ORSAY
Série A,
Nº d'ordre .
260

A.O. 1789

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY
UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES

PAR

RIPKA Georges

PREMIÈRE THÈSE

Théorie Hartree-Fock de la forme d'équilibre des noyaux légers

DEUXIÈME THÈSE

Propositions données par la Faculté

Soutenues le 1967 devant la Commission d'examen

MM. YVON — Président

JANCOVICI
Mme BENOIST-GUEUTAL
M. BLOCH
} Examinateurs

ORSAY
Série A,
N° d'ordre .
260

A.O. 1789

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY
UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS-SCIENCES

PAR

RIPKA Georges

PREMIÈRE THÈSE

Théorie Hartree-Fock de la forme d'équilibre des noyaux légers

DEUXIÈME THÈSE

Propositions données par la Faculté

Soutenues le devant la Commission d'examen

MM. YVON — Président

JANCOVICI
Mme BENOIST-GUEUTAL
M. BLOCH
} Examinateurs

UNIVERSITE DE PARIS - FACULTE DES SCIENCES DE PARIS

Professeurs

Le Doyen
M. ZAMANSKY

MM.	PRENANT	T Anatomie & histologie comparée
	GRASSE	T Evolution des êtres organisés
	PREVOST	T Chimie organique
	WYART	T Minéralogie & cristallographie
	TEISSIER	T Zoologie
	AUGER	T Physique quantique & relativité
	MONNIER	T Physiologie générale
	PIVETEAU	T Paléontologie
	ROCARD	T Physique E.N.S.
	CARTAN	T Mathématiques E.N.S.
	LAFFITTE	T Chimie générale
	N...	T Géométrie supérieure
	COULOMB	T Physique du globe
Mlle	COUSIN	T Biologie animale SPCN
MM.	CHRETIEN	T Chimie minérale
	BOCQUET	T Zoologie
	KASTLER	T Physique E.N.S.
	EPHRUSSI	T Génétique
	GAUTHERET	T Biologie végétale CPEM
	LUCAS R.	Recherches physiques
	THOMAS A.	T Biologie cellulaire
	MORAND	T Physique enseignement
	SOLEILLET	T Physique CPEM
	FORTIER	T Mécanique expérimentale des fluides
	DRACH	T Zoologie
	QUENEY	T Météorologie & dynamique de l'atmosphère
	GALLIEN	T Embryologie
	EICHHORN	T Botanique
	DE CUGNAC	T Biologie végétale SPCN
Mlle	CAUCHOIS	T Chimie physique
MM.	THELLIER	T Physique du globe
	PONCIN	T Mécanique générale
	DUBREIL	T Arithmétique & théorie des nombres
	QUELET	T Chimie organique
	CAGNIARD	T Géophysique appliquée
	CHAMPETIER	T Chimie macromoléculaire
	CUVILLIER	T Micropaléontologie
	JUNG	T Géologie
	TRILLAT	T Microscopie & diffraction électronique
	WIEMANN	T Chimie organique & structurale
	VASSY	T Physique de l'atmosphère
	DESTOUCHES	T Théorie physique
	AMIEL	T Chimie générale
	HOCART	T Minéralogie & cristallographie
	J.P. MATHIEU	T Physique optique
	COUTEAUX	T Cytologie
	CHOQUET	T Théorie des fonctions & topologie
	FELDMANN	T Biologie végétale marine
	JOST	T Physiologie comparée
	FORTET	T Calcul des probabilités & physique mathématiques
	SCHWARTZ	T Calcul différentiel & intégral
	CHOUARD	T Physiologie végétale
	MALAVARD	T Aviation (technique aéronautique)
	BRELOT	T Analyse supérieure
	NORMANT	T Synthèse organique
	BENARD	T Chimie appliquée
	DUGUE	T Statistique mathématique
	SOULAIRAC	T Psychophysiologie
	ULRICH	T Physiologie végétale appliquée
	KIRRMANN	T Théories chimiques
	CHADEFAUD	T Botanique
Mlle	LE BRETON	T Physiologie de la nutrition
MM.	LELONG	T Application de l'analyse à la géométrie
	DEVILLERS	T Anatomie & histologie comparées
	EHRESMANN	T Topologie algébrique
	FRANÇON	T Physique SPCN
	GLANGEAUD	T Géographie physique, géologie dynamique
	DODEMENT	T Mathématiques MGP
	PISOT	T Technique mathématique de la physique
	ROCH	T Géologie
	SCHATZMANN	T Astrophysique
	TERMIER	T Géologie générale
	ZAMANSKY	T Mathématiques générales
	LENNUIER	T Physique M.G.P.
	ROUTHIER	T Géologie appliquée
Mme	TONNELAT	T Physique théorique
MM.	DIXMIER	T Mathématiques M.P.C.
	SOUCHAY	T Chimie générale
	AIGRAIN	T Electrotechnique
	BRUSSET	T Chimie systématique
M.	LEVY	T Physique théorique des hautes énergies
Mme	CHAIX	T Chimie biologique
MM.	HUREL PY	T Biologie végétale CPEM
	PANNETIER	T Chimie générale I
	BRUN	T Mécanique des fluides I
Mme	DUBREIL	T Mathématiques (Agrégation)
Mme	LELONG	T Mathématiques II E.N.S.
MM.	BELLAIR	T Géologie S.P.C.N.
	COTTE	T Physique électricité
	DUBOIS J.E.	T Chimie organique physique
	LAMOTTE	T Zoologie E.N.S.
	OLMER	T Energétique générale
	GAUTHIER	T Mécanique appliquée
	BARCHEWITZ	T Chimie physique
	BROSSEL	T Physique atomique
	BUSER	T Physiologie comparée
	CAMUS	T Physiologie végétale
	CURIEN	T Minéralogie & cristallographie
	POSSOMPES	T Zoologie
	PULLMANN	T Chimie quantique
	TEILLAC	T Physique nucléaire & radio-activité
	VILLE	T Econométrie
	WILLEMART	T Chimie CPEM
	FREYMANN	T Recherches physiques
	ROLLET	T Chimie minérale
Mlle	JOSIEN	T Chimie SPCN
MM.	CHEVALLEY	T Géométrie algébrique & théorie des groupes
	GERMAIN	T Mécanique théorique des fluides
	LUCAS G.	T Géologie
	ALLARD	T Chimie physique
	BERTHELOT	T Physique des particules fondamentales
	BRICARD	T Météorologie
Mme	ALBE-FESSARD	T Psycho-physiologie
MM.	JULIA	T Etude des molécules naturelles complexes
	MAGAT	T Physico-chimie des rayonnements
Mlle	QUINTIN	T Electrochimie
MM.	MONOD	T Chimie du métabolisme
	DE POSSEL	T Analyse numérique
	CHARLOT	T Chimie analytique
	CHATELET	T Chimie CPEM
	MATTLER	T Physique SPCN
	BOUISSIERES	T Radiochimie
Mme	COUTURE	T Thermodynamique & mécanique physique
MM.	FRANC	T Biologie animale CPEM
	SCHNELL	T Botanique tropicale
	STOLKOWSKI	T Physiologie générale
	ACHER	T Chimie biologie
	BAUDOIN	T Biologie animale CPEM
	BEAUMONT	Biologie animale SPCN
	BLAMONT	Géophysique ionosphère
	BOUREAU	T Botanique
	CURIE D.	Physique MGP
	DURAND DELGA	T Géologie
	HELLER	T Physiologie végétale
	TORTRAT	T Calcul des probabilités
	CAILLEUX	T Géologie SPCN
	MAGNAN	Physique électricité
	DAUDEL	T Mécanique ondulatoire
Mlle	FOURCROY	Biologie végétale SPCN
Mme	CHOQUET BRUHAT	Mécanique analytique & mécanique céleste
Mlle	VEIL	T Physiologie générale
MM.	LWOFF	T Microbiologie
	SIESTRUNCK	T Mécanique physique & expérim.
	CABANNES	T Mécanique générale
	CAIRE	T Géographie physique & géologie dynamique
	COMOLET	Mécanique des fluides
	DELLOUE	T Physique de l'exosphère
	HOUILLON	Biologie animale CPEM
	OLIVIER	Anthropologie
	SAMUEL	T Mathématiques (ENS Jeunes filles)
	THIRY	T Mécanique céleste
	ABELES	T Physique SPCN
	AMAT	T Thermodynamique
	AUBOIN	T Géologie
Mme	BENOIT-GUEUTAL	T Physique nucléaire & radio-activité
M.	BOUGIS	Biologie végétale marine Villefranche s/Mer
MM.	RIGAUDY	T Chimie SPCN
	COLLONGUES	Chimie CPEM
	DUBERT	Biochimie
	NOZIERES	Physique générale
	CADIOT	Chimie organique
	IVANOFF	Océanographie physique
	FRANÇOIS	Zoologie
	TALBOT	Génie chimique
Mme	NOUGAREDE	Botanique
MM.	BRUHAT	T Mathématiques MPC
	FOURNET	Electricité générale
	DEHEUVELS	T Mathématiques propédeutique
	FURON	T Géologie SPCN
Mme	GANS	T Génétique
MM.	GENEVES	Biologie végétale CPEM
	HUPE	T Pétrographie
	HOLLANDE	T Biologie générale
	LIONS	T Analyse numérique
	MAITTE	T Chimie organique
	NICOLAS	Géologie appliquée
	PANIGEL	Biologie générale
	RAVIER	T Pétrographie
	MOREL F.	T Physiologie comparée
	ROSEAU	T Mécanique théorique des fluides
	ROUBINE	Electronique E.S.E.
	SILBER	T Chimie CPEM
	UEBERSFELD	T Electronique
	HERVE	T Théories physiques
Mme	PECKER-WIMEL	T Mathématiques
MM.	BALKANSKI	T Astrophysique
	LE CORRE	Physique M.P.C.
	NATAF	T Electricité
	ECHALIER	T Physique nucléaire & radio-activité
	BARRAUD	Biologie animale CPEM
	DARS	T Physique CPEM
	CAMEFORT	Géologie structurale & appliquée
	VICHNIEWSKY	T Botanique (agrégation)
	SIGWALT	T Mécanique industrielle
	BLAQUIERE	T Chimie SPCN
	BARUCH	Electronique
	ARNOUS	Physique propédeutique
	SLONIMSKI	T Physique théorique
	MALLIAVIN	Génétique
	GAUDEMAR	T Mathématiques propédeutique
	BROUSSE	Chimie propédeutique
	ROSCH	T Mécanique théorique
	GUY	T Astronomie
	LAZARD	T Physique expérimentale
	MOREL P.	Mathématiques MPC
	ARSAC	Physique MPC
	LEFEBVRE	Programmation
	BOK	Chimie MPC
	CHAPEVILLE	Physique propédeutique
	BENOIT	Biochimie
	RIO	Physique CPEM
	JAUZEIN	Chimie CPEM
	PREVOST G.	Géologie ENS
	FAVARD P.	Biologie végétale CPEM
Mme	CHARNIAUX-COTTON	Biologie animale CPEM
Mlle	FICINI	Evolution des êtres organisés
MM.	LEQUEUX	Chimie CPEM
	COHEN TANNOUDJI	Astronomie
	TAVERNIER	Physique atomique
	DURAND Michel	Physique CPEM
	PASCAUD	Biologie animale SPCN
Mme	PETIT	Physiologie
MM.	CAGNAC	Biologie animale CPEM
	FALK-VAIRANT	Physique agrégation
	KRASNER	Physique nucléaire
	BENZECRI	T Mathématiques
	VINH MAU	T Statistiques
	DUQUESNES	Physique M.G.P.
	SCHUTZENBERGER	Physique CPEM
	TREMILLON	Programmation
	FAYARD	Chimie MPC
	BUVET	Chimie MPC
	AUTHIER	Chimie CPEM
	PICINBONO	Physique MPC
	BONNEFILLE	T Physique CPEM
Mme	PUISEUX DAO	Electrotechnique
		Biologie végétale

UNIV. LEIDEN BIBL.

UNIVERSITE DE PARIS - FACULTE DES SCIENCES D'ORSAY

Professeurs

MM.	MANGENOT G.	T Biologie végétale
	JACQUINOT P.	T Optique
	GUINIER A.	T Electricité & physique des solides
	GRIVET P.	T Electronique
	BLANC-LAPIERRE A.	T Accélérateur linéaire
	L'HERITIER P.	T Génétique des virus
	LEMEE G.	T Ecologie végétale
	MOYSE A.	T Physiologie végétale
	DODE M.	T Chimie thermodynamique
	DENY J.	T Mathématiques
	RIVIERE A.	T Géologie générale & sédimentologie
	MICHEL A.	T Chimie minérale
	MAY R.	T Anatomie comparée
	DELANGE H.	T Mathématiques
	CHAPELLE J.	T Physique expérimentale
	LACOMBE P.	T Métallurgie
	BENOIT P.	T Physiologie générale
	GUINOCHET J.	T Biologie végétale SPCN
	NERON A.	T Mathématiques
	NOZERAN R.	T Botanique approfondie
	CASTAING R.	T Thermodynamique
	ELLENBERGER F.	T Géologie structurale
	LEDERER E.	T Chimie biologique
	RIZET J.	T Génétique
	LENDER T.	T Biologie animale SPCN
	POITOU G.	T Mathématiques
	FREON P.	T Chimie organique
	TONNELAT	T Biologie physico-chimique
	BRUNN Jan	T Géologie historique
	JEAN M.	T Physique nucléaire
MM.	BERGERARD J.	T Zoologie
	ROGER J.	T Paléontologie
	LEFORT M.	T Chimie nucléaire
	LAGARRIGUE A.	T Physique des hautes énergies
	JULLIEN J.	T Chimie structurale organique
	ARNULF A.	T Optique
	ROUAULT M.	T Diffraction électronique
	MARECHAL A.	T Optique théorique et appliquée
	MAZET R.	T Mécanique générale
	DAVID Serge	T Chimie agrégation
	GUERIN H.	T Chimie des gaz et des combustibles
	LESIEUR L.	T Mathématiques MPC et algèbre
	KOURGANOFF	T Astronomie
	ARNOULT P.	T Physique électronique
	KAHANE J.P.	T Mathématiques
	BROCHARD J.	T Physique propédeutique
Mme	ROIZEN	T Physique C.P.E.M.
MM.	BERTEIN F.	T Electronique
	MALGRANGE B.	T Mathématiques
	CORABOEUF E.	T Physiologie animale
	FRIEDEL J.	T Physique des solides
	CHEVAUGEON J.	T Cryptogamie
	MEYER P.	T Physique théorique & atomique
	LEHMANN P.	T Accélérateur linéaire
	CHABBAL R.	T Physique propédeutique
	DELCROIX J.M.	T Physique des plasmas
	CERF J.	T Mathématiques
	D'ESPAGNAT B.	T Physique théorique
	SCHAEFFER P.	T Microbiologie
	DE GENNES P.	T Physique des solides
Mme	MARTY N.	Physique propédeutique
MM.	GOURDIN M.	Physique théorique
	PEREZ-Y-JORBA	Physique propédeutique
	GORENFLOT E.	Biologie végétale SPCN
	RIOU M.	Physique nucléaire
	BROUSSE R.	Géologie S.P.C.N.
	LIORET C.	Physiologie végétale
	CLAUSER H.	Chimie biologique
	JANCOVICI B.	Physique atomique
	LURCAT J.	Physique propédeutique
	LE BERRE J.	Entomologie
	LAVOREL J.	Biophysique
	PERIO P.	Physique propédeutique
	FETIZON M.	Stéréochimie
	CHEMLA M.	Chimie des isotopes
	MAZIERES C.	Chimie SPCN
	VILKAS M.	Chimie C.P.E.M.
	BLANDIN A.	Physique des solides
	BRUN G.	Génétique
	MERCOUROFF	Physique agrégation
	ANDRE J.	Microscopie électronique
	CHEVALLIER F.	Physiologie animale
Mlle	MARCOU	Biologie cellulaire C.P.E.M.
MM.	BOURDU R.	Physiologie végétale
	BERKALOFF A.	Biologie animale CPEM
Mlle	LEFORT M.	Biologie cellulaire CPEM
Mme	LAMBERT	Physique C.P.E.M.
MM.	BIZOT J.C.	Physique M.P.C.
	GUIRAUD J.P.	Mécanique
	LABOUESSE B.	Chimie SPCN

TABLE DES MATIÈRES

- Remerciements 7

I - Introduction 9

II - Les équations de Hartree-Fock 15

Définitions des états, du hamiltonien et des orbites de Hartree-Fock. Equations de Hartree-Fock.

III - Les invariances du Hamiltonien de Hartree-Fock et le choix d'une base pour le développement des orbites 21

Théorème sur les symétries possibles du champ moyen de Hartree-Fock. Le choix d'une base. Symétrie par rapport au renversement du temps. Symétries axiale, ellipsoïdale et de rotation dans l'espace du spin et de l'isospin. Symétrie sphérique. Les effets des symétries sur les spectres des noyaux. Mélange de couches majeures.

IV - Les calculs de Hartree-Fock dans une seule couche majeure 35

Restriction du développement des orbites. Les solutions sphériques. L'utilisation d'un noyau de référence à couches complètes. Le choix de l'intensité de l'interaction nucléon-nucléon, des énergies ε_j de particule indépendante et de la constante de l'oscillateur harmonique.

V - Les résultats des calculs de Hartree-Fock dans une couche majeure pour les noyaux pair-pairs $N = Z$. 47

Les solutions sphériques. Les fonctions d'onde des solutions ayant la symétrie axiale et ellipsoïdale. La lacune en énergie dans le spectre des orbites de Hartree-Fock. Etats excités déformés des noyaux sphériques.

VI - Un modèle soluble : les effets des composantes d'échange de la force nucléon-nucléon. 57

Solution exacte des équations de Hartree-Fock pour une force de portée infinie dans une couche. L'effet de la non-localité du champ moyen de Hartree-Fock sur la lacune en énergie du spectre des orbites.

VII - La déformation du champ moyen : la force quadrupole-quadrupole 65

Solutions des équations de Hartree-Fock avec une force monopolaire et quadrupole-quadrupole. Comparaison entre les orbites de Hartree-Fock et celles d'un oscillateur déformé (Nilsson). Comparaison entre les états projetés de Hartree-Fock et les états (λ,μ) de J.P. Elliott et M. Moshinski.

VIII - Les effets de l'interaction spin-orbite. 77

Analyse des effets d'une interaction spin-orbite à un corps a $\vec{\ell}.\vec{s}$ ajoutée au hamiltonien de Hartree-Fock calculé avec une force centrale sur la lacune en énergie et la stabilité des solutions.

IX - La multiplicité des solutions des équations de Hartree-Fock. 83

X - Les solutions des équations de Hartree-Fock pour les autres noyaux. 85

Discussion des solutions des noyaux pair-pairs ayant un excès de neutrons, des noyaux pair-impairs et impair-impairs.

XI - Les moments magnétiques des noyaux pair-impairs. 89

XII - La projection du moment cinétique. 95

Le modèle adiabatique et le spectre de rotation obtenu par projection exacte du moment cinétique. Méthodes de projection. Critique de la validité du modèle adiabatique dans les noyaux légers. Les moments d'inertie des noyaux pair-pairs obtenus par projection exacte. Comparaison avec les résultats expérimentaux et la formule d'Inglis. Discussion des effets des termes d'échange de la force sur le moment d'inertie. Comparaison entre la solution de Hartree-Fock projetée et la solution exacte obtenue par diagonalisation pour le ^{19}F .

XIII - Les calculs de Hartree-Fock sans restriction à une couche majeure : la polarisation quadrupolaire des couches complètes. 115

La nécessité d'étendre l'espace des configurations pour expliquer les déformations quadrupolaires. Le choix d'un espace de configurations. Solutions obtenues avec une force de Volkov. Discussion des effets de mélange des couches majeures. L'incompressibilité du noyau. Comparaison au modèle de Mottelson. Les effets de l'énergie cinétique et la compatibilité entre les modèles de Mottelson et de Elliott. Tracé des contours d'équidensités des noyaux déformés.

Conclusion 139

Tableaux 141

Appendice A : Les fonctions de base 161

Appendice B : Eléments de matrice d'une interaction centrale 167

Références 177

REMERCIEMENTS

Je remercie le Commissariat à l'Energie Atomique pour les facilités de travail qui m'ont été accordées et pour la Bourse-Thèse qui m'a permis de commencer ce travail.

Monsieur le Professeur J. YVON a bien voulu patronner cette thèse et je lui en suis très reconnaissant.

Je veux exprimer ma profonde gratitude au Professeur C. BLOCH pour m'avoir accueilli dans le Département de Physique Théorique, m'avoir procuré les meilleures conditions de travail et m'avoir donné de nombreux conseils qui m'ont beaucoup aidés. Par ailleurs, les cours qu'il a professés à l'I.N.S.T.N. m'ont été très profitables.

Monsieur Vincent GILLET a dirigé mes premiers travaux en physique nucléaire et je tiens à le remercier tout particulièrement pour tous ses conseils et pour tous ses encouragements qui m'ont été extrêmement utiles.

Je remercie également le Professeur A. MESSIAH pour de nombreuses discussions dont j'ai beaucoup profité .

Les travaux du Professeur C.A. LEVINSON sont à la source de cette étude. Par la suite une étroite collaboration nous a réunis et le fructueux échange d'idées qui en a résulté a été déterminant dans la réalisation de ce travail. C'est un plaisir pour moi de lui exprimer ici mes plus vifs remerciements.

Une grande partie de ce travail a été faite en collaboration avec M.B. GIRAUD et M.W.H. BASSICHIS. Notre travail en commun a été aussi agréable que fructueux et je tiens à les en remercier.

Les nombreuses discussions avec les physiciens de Saclay et d'autres laboratoires m'ont également été d'un grand profit, en particulier celles que j'ai eues avec M.J. RAYNAL, M.M. GAUDIN et MM. les Professeurs S.A. MOSZKOWSKI, G. BROWN, M. BANERJEE et A. VOLKOV .

Ce travail a exigé de nombreux calculs numériques. Je remercie M.A. AMOUYAL, Chef du Département de Calcul Electronique, ainsi que M. MENGIN, M. GUERIN et M. DANDEU pour les facilités d'accès à l'ordinateur I.B.M. 7094. Si les calculs ont pu être menés à bien rapidement c'est grâce à Mademoiselle C. CHEVEREAU dont la compétence et le dévouement m'ont été indispensables. Je la remercie vivement.

Je suis très reconnaissant au Professeur M. BARANGER d'avoir formulé des critiques qui ont contribué à améliorer le texte.

Mademoiselle D. DUBOST a dactylographié le texte avec autant de soin que de rapidité. Madame M. PORNEUF et Madame F. LEFEVRE ont accepté la tâche ingrate de relire et corriger le texte. Je leur en suis extrêmement reconnaissant.

CHAPITRE I

INTRODUCTION

L'existence de bandes de rotation dans les spectres des noyaux de la couche 2s-1d ($16 < A < 40$) et dans une moindre mesure dans ceux des noyaux de la couche 1p ($4 < A < 16$) est connue depuis longtemps. Ces bandes de rotation sont caractérisées par l'espacement approximatif en $J(J + 1)$ de niveaux de moment cinétique J, et par de grands moments et transitions quadrupolaires. Bien que dans les noyaux légers ces caractères ne soient pas aussi prononcés que dans les noyaux déformés lourds l'interprétation des données expérimentales à l'aide d'un état déformé en rotation s'impose. L'objet de ce travail est le calcul et l'étude des déformations dans les noyaux légers avec la théorie de Hartree-Fock.

La théorie de Hartree-Fock est bien connue en physique atomique. Elle est une description approchée dans laquelle on suppose que les nucléons se déplacent indépendamment dans un potentiel moyen qui résulte de la somme des interactions de ce nucléon avec les autres nucléons du noyau, moyennée sur les fonctions d'onde de ces autres nucléons. La description d'un noyau par une fonction d'onde de particules indépendantes soulève immédiatement l'objection suivante : on pense actuellement que l'interaction entre deux nucléons est fortement répulsive à courte distance. Une telle répulsion empêche les nucléons de s'approcher de trop près et elle produit ainsi une corrélation de deux corps à courte portée qui ne peut pas être obtenue avec une fonction d'onde de par-

ticules indépendantes. Néanmoins, le grand succès du modèle de particules indépendantes -voir le modèle des couches- suggère que les corrélations à courte portée ne jouent pas un rôle important dans beaucoup de propriétés des noyaux. Nous pensons donc que les fonctions d'onde obtenues par la théorie de Hartree-Fock ont un sens lorsqu'elles sont calculées avec une force effective dans laquelle on a éliminé la forte répulsion à courte portée. Le calcul explicite de la force effective à partir de la force nucléon-nucléon est actuellement l'objet de nombreux travaux[36] et nous n'aborderons pas ce sujet. Ces travaux se concentrent surtout sur le calcul des rayons d'équilibre et des énergies de liaison, c'est-à-dire sur les proprietés de saturation des noyaux.

Ce travail se concentre surtout (mais pas exclusivement) sur les systèmes de neutrons et de protons en interaction dans une couche majeure. La dépendance radiale des fonctions d'onde est donnée à priori dans ce cas et le problème de la stabilité radiale du noyau n'est pas soulevé. Nous montrerons que la théorie de Hartree-Fock est une méthode extrêmement utile pour calculer le mélange de configurations dans une couche majeure. Nous l'appliquerons également au calcul du mélange de configurations de plusieurs couches majeures qui produit les déformations quadrupolaires et la charge effective. Ces phénomènes dépendent essentiellement des composantes à longue portée de la force dont le choix est par conséquent moins critique que pour le calcul des propriétés de saturation des noyaux.

Les théories des spectres de rotation font pour la plupart appel au modèle unifié de Bohr et de Mottelson[1], dans lequel le mouvement collectif de rotation est séparé adiabatiquement du mouvement individuel des nucléons. Par exemple, dans ce modèle un état de moment cinétique J appartenant à une bande de rotation d'un noyau pair-pair est représenté par la fonction d'onde :

$$|JM\rangle = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}}\, D^{J*}_{MO}(\Omega)\, |\Phi_o\rangle \qquad J = 0, 2, 4, \ldots \qquad (1)$$

Le mouvement de rotation est représenté par la fonction d'onde d'un rotateur[2] :

$$D^{J*}_{MO}(\Omega) = \sqrt{\frac{4\pi}{2J+1}}\, Y^{J}_{M}(\beta,\gamma) \quad ,$$

et le mouvement des nucléons est représenté par une fonction d'onde intrinsèque $|\Phi_o\rangle$. Cette séparation du mouvement collectif de rotation et du mouvement individuel des nucléons n'est possible que si l'énergie d'excitation des nucléons (c'est-à-dire l'énergie d'excitation de l'état intrinsèque) est plus grande que l'énergie d'excitation de la rotation (c'est-à-dire l'espacement des niveaux de la bande de rotation). Nous montrerons dans le chapitre V que cette condition est remplie dans les noyaux pair-pairs $N = Z$ pour lesquels une grande lacune en énergie dans le spectre des états de particule indépendante élève l'énergie d'excitation des nucléons à 8 MeV environ tandis que les états 2^+ et 4^+ des bandes de rotation ont environ 1,7 MeV et 4^+ MeV d'excitation. Mais nous montrerons aussi dans le chapitre XII qu'une grande énergie d'excitation des nucléons individuels n'est pas une condition suffisante pour la validité de la fonction d'onde (1) et nous y montrerons que la variable collective Ω n'est pas toujours bien définie.

L'hypothèse la plus simple qu'on puisse faire sur la nature de l'état intrinsèque $|\Phi_o\rangle$ est celle d'un état de particules indépendantes composé de nucléons qui se déplacent dans les orbites λ d'un potentiel déformé :

$$|\Phi_o\rangle = b^{\dagger}_{\lambda_1} b^{\dagger}_{\lambda_2} \cdots b^{\dagger}_{\lambda_A} |o\rangle$$

$b^{\dagger}_{\lambda}$ est un opérateur qui crée un nucléon dans l'orbite λ (voir le chapitre II). Les orbites λ sont les états propres d'un hamiltonien à un corps qui représente le potentiel déformé :

$$h\,\varphi_\lambda = e_\lambda\,\varphi_\lambda \quad .$$

Le hamiltonien h peut être le résultat soit d'un choix phénoménologique soit d'un calcul explicite à partir des interactions entre les nucléons. Un choix phénoménologique qui a eu un grand succès est celui d'un oscillateur harmonique déformé avec un terme spin-orbite[4] :

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{1}{2}m\left[\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right] + a\,\vec{l}.\vec{s} \quad . \tag{2}$$

Les orbites qui en résultent sont les orbites de Nilsson[4]. Le choix du hamiltonien h ainsi que le choix de quelles orbites sont occupées par les nucléons détermine entièrement la fonction d'onde intrinsèque $|\Phi_o\rangle$. Les paramètres du hamiltonien h sont phénoménologiques et ils peuvent être choisis de façon à rendre compte d'un grand nombre de données expérimentales telles que les spins des niveaux, la radioactivité β , les moments magnétiques et quadrupolaires. Mais il est également possible de calculer les paramètres du hamiltonien h par une méthode variationnelle de la façon suivante : l'état intrinsèque $|\Phi_o\rangle$ est une fonction de ces paramètres. On varie ces paramètres afin de minimiser la valeur moyenne dans l'état $|\Phi_o\rangle$ non pas du hamiltonien à un corps h mais du hamiltonien nucléaire à N-corps :

$$H = \sum_{i=1}^{A} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(ij) \quad . \tag{3}$$

Dans cette méthode le hamiltonien à un corps ne sert qu'à engendrer les orbites λ et à paramétriser la fonction d'onde $|\Phi_o\rangle$. Les formes d'équilibre des noyaux ont été étudiées par cette méthode à la fois dans la couche 1p [5] et dans la couche 2s-1d[6]. Cette méthode peut être considérée comme une forme approchée de la théorie de Hartree-Fock.

Dans ce travail nous avons appliqué la théorie de Hartree-Fock à un calcul explicite du hamiltonien h à partir des interactions entre les nucléons.

Dans les chapitres II et III la théorie de Hartree-Fock est exposée et les symétries des solutions sont discutées. La première application aux noyaux déformés a été faite par Kelson[7]. Dans les chapitres IV et V nous présentons les calculs détaillés et les fonctions d'onde des noyaux pair-pairs $N = Z$. Nous montrons dans le chapitre VI que la grande lacune en énergie dans le spectre des orbites est reliée à la non-localité du potentiel moyen[10][11]. Cette lacune en énergie est une des différences principales entre les orbites du champ Hartree-Fock et les orbites de Nilsson. Elle permet de rendre compte des énergies de séparation des neutrons et elle a permis un calcul des états excités de vibration de l'état intrinsèque[9]. Nous montrons dans le chapitre VII que la déformation du potentiel moyen est très semblable à celle qui est produite par une force quadrupole-quadrupole. Nous comparons les états de Hartree-Fock aux états qui diagonalisent la force quadrupole-quadrupole dans une couche majeure. Ces états ont été obtenus par J.P. Elliott et M. Moshinsky[13]. La différence entre ces états et les états Hartree-Fock provient surtout de l'interaction spin-orbite qui est discutée dans le chapitre VIII. L'interaction spin-orbite devient importante surtout dans la seconde moitié de la couche 2s-1d où la théorie de Hartree Fock ne prévoit pas toujours une déformation stable du noyau (chapitre IX). Dans le chapitre X nous étudions les noyaux qui ne sont pas pair-pairs $N = Z$. La théorie Hartree-Fock a également été appliquée aux formes d'équilibre excitées [14][15][16] qui sont discutées à la fin du chapitre V.

Dans le chapitre XI nous calculons les moments magnétiques des noyaux pair-impairs. Dans le chapitre XII nous étudions les rotations des états déformés et nous examinons la validité du modèle adiabatique en appliquant la théorie de Peierls-Yoccoz[26] à la projection du moment cinétique[15]. Enfin, dans le chapitre XIV nous montrons que la théorie de Hartree-Fock permet de calculer la polarisation quadrupolaire des couches complètes.

Nous avons essayé de présenter l'essentiel des résultats obtenus par la théorie de Hartree-Fock dans les noyaux légers ainsi que les limites de son application. Nous avons développé la théorie dans la forme qui nous a semblé la mieux adaptée aux calculs numériques et nous avons donné assez de détails pour permettre au lecteur d'entreprendre ses propres calculs.

CHAPITRE II

LES ÉQUATIONS DE HARTREE-FOCK

La théorie de Hartree-Fock décrit le noyau par une fonction d'onde de particules indépendantes

$$|\Phi\rangle = b^{\dagger}_{\lambda_1} \; b^{\dagger}_{\lambda_2} \ldots b^{\dagger}_{\lambda_A} \; |0\rangle \quad . \tag{4}$$

Nous dirons que les A nucléons du noyau occupent les orbites λ_i , $(i = 1,2,\ldots,A)$. Les orbites λ sont des états propres d'un hamiltonien à un corps h que nous allons déterminer :

$$h \, \varphi_\lambda = e_\lambda \, \varphi_\lambda \quad . \tag{5}$$

Les orbites φ_λ forment un ensemble orthonormal et complet de fonctions d'onde à une particule dont A seulement sont utilisées pour former l'état $|\Phi\rangle$. Nous appellerons la mer de Fermi l'ensemble des A orbites occupées dans l'état $|\Phi\rangle$. Les opérateurs $b^{\dagger}_{\lambda}$ créent un nucléon qui occupe l'orbite λ . Ils obéissent aux règles d'anticommutation

$$\left[b^{\dagger}_{\lambda} \, , \, b_{\mu} \right]_+ = \delta_{\lambda\mu} \qquad \left[b_{\lambda} \, , \, b_{\mu} \right]_+ = 0 \quad . \tag{6}$$

Dans une représentation donnée l'état $|\Phi\rangle$ est un déterminant de Slater. On détermine les orbites λ en exigeant que l'énergie du système dé-

crit par la fonction d'onde $|\Phi\rangle$ soit stationnaire par rapport à des variations infinitésimales des orbites λ .

L'énergie du système est obtenue en prenant la valeur moyenne dans l'état $|\Phi\rangle$ du hamiltonien H du système :

$$H = T + V$$
$$\equiv \sum_{\lambda\mu} \langle\lambda|t|\mu\rangle b_\lambda^\dagger b_\mu + \frac{1}{4} \sum_{\lambda\mu\rho\delta} \langle\lambda\mu|v|\rho\delta\rangle b_\lambda^\dagger b_\mu^\dagger b_\delta b_\rho \quad , \tag{7}$$

$t = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ est l'opérateur de l'énergie cinétique d'un nucléon. $\langle\lambda\mu|v|\rho\delta\rangle$ est l'élément de matrice antisymétrisé de l'interaction nucléon-nucléon :

$$\langle\lambda\mu|v|\rho\delta\rangle = \langle 0| b_\mu b_\lambda V b_\rho^\dagger b_\delta^\dagger |0\rangle = -\langle\lambda\mu|v|\delta\rho\rangle \quad . \tag{8}$$

A l'aide du théorème de Wick on obtient l'expression suivante pour l'énergie du système :

$$E_{HF} = \langle\Phi|H|\Phi\rangle = \sum_{\lambda=1}^{A} \langle\lambda|t|\lambda\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\lambda,\mu=1}^{A} \langle\lambda\mu|v|\lambda\mu\rangle \quad . \tag{9}$$

Les sommes sont limitées aux orbites occupées de la mer de Fermi. Nous pouvons développer les orbites λ sur une base d'états j connus :

$$\varphi_\lambda = \sum_j C_j^\lambda \varphi_j \quad . \tag{10}$$

La base j peut se composer par exemple des états $(n\ell jm\tau)$ du modèle des couches dans un oscillateur harmonique. On peut utiliser n'importe quelle base pour développer les orbites à condition de savoir calculer les éléments de matrice de t et v dans cette base. Le choix de la base j et la convergence du développement (10) seront discutés dans le chapitre III.

La fonction d'onde $|\Phi\rangle$ est déterminée par les coefficients C_j^λ qui sont des paramètres variationnels soumis aux restrictions d'orthonormalisation des orbites :

$$\sum_j C_j^{\lambda^*} C_j^{\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} \quad . \tag{11}$$

L'énergie du système sera stationnaire lorsque

$$\frac{\partial}{\partial C_j^{\lambda^*}} \left[\langle \Phi | H | \Phi \rangle - \sum_{\mu\mu'} \alpha_{\mu\mu'} \sum_j C_j^{\mu^*} C_j^{\mu'} \right] = 0 \quad . \tag{12}$$

Les $\alpha_{\mu\mu'}$ sont des paramètres de Lagrange introduits à cause des restrictions (11).

En remplaçant le développement (10) des orbites dans l'expression (9) l'énergie s'écrit en fonction des paramètres variationnels C_j^λ et des éléments de matrice de t et de v dans la base connue j . On peut alors calculer directement la dérivée (12) et on obtient les équations couplées.

$$\sum_{j'} \left[\langle j|t|j' \rangle + \sum_{\lambda=1}^{A} \sum_{j_1 j_2} C_{j_1}^{\lambda^*} \langle j\, j_1 | v | j' j_2 \rangle C_{j_2}^\lambda \right] C_{j'}^\lambda = \sum_\mu \alpha_{\lambda\mu} C_j^\mu \quad . \tag{13}$$

On voit qu'une solution est obtenue par le problème aux valeurs propres :

$$\sum_{j'} \langle j|h|j' \rangle C_j^\lambda = e_\lambda C_j^\lambda \quad , \tag{14}$$

où $\alpha_{\lambda\mu} = \delta_{\lambda\mu} e_\lambda$.

Le hamiltonien à un corps h , que nous appellerons le hamiltonien de Hartree-Fock est défini par ses élements de matrice :

$$\langle j|\, h\, |j'\rangle = \langle j|\, t\, |j'\rangle + \sum_{\lambda=1}^{A} \langle j\lambda|\, v\, |j'\lambda\rangle$$

$$= \langle j|\, t\, |j'\rangle + \sum_{\lambda=1}^{A} \sum_{j_1 j_2} C^{\lambda *}_{j_1} \langle jj_1|\, v\, |j' j_2\rangle\ C^{\lambda}_{j_2} \quad . \qquad (15)$$

Les équations (14) et (15) sont les équations de Hartree-Fock qui déterminent les fonctions d'onde des orbites λ . L'équation (14) n'est autre que l'équation de Schrödinger (5) écrite dans la représentation j . On peut également exprimer l'équation de Schrödinger (14) dans l'espace des configurations. On obtient alors une équation intégro-différentielle souvent utilisée en physique atomique. En physique nucléaire la convergence du développement (10) des orbites est souvent assez rapide pour que la forme matricielle (14) et (15) des équations de Hartree-Fock permette de trouver une solution suffisamment précise avec des matrices d'ordre fini.

On résout les équations de Hartree-Fock par un processus itératif bien connu :

a) - On commence par deviner un ensemble de coefficients C^{λ}_{j} qui constituent une solution approchée. On décide également quelles orbites sont occupées.

b) - Avec cette solution approchée on calcule les éléments de matrice (15) du hamiltonien de Hartree-Fock

c) - On résout l'équation (14) en diagonalisant la matrice (15) du hamiltonien de Hartree-Fock. On obtient alors de nouveaux coefficients C^{λ}_{j} ainsi que les énergies e_{λ} des orbites, qui constituent une nouvelle solution approchée. On décide quelles orbites sont occupées et on revient à l'étape b .

Le processus itératif converge lorsque les diagonalisations successives donnent les mêmes coefficients C^{λ}_{j} . L'énergie (9) du système est un polynôme des

coefficients C_j^λ et par conséquent elle possède plusieurs minimums et maximums locaux. Il y a donc plusieurs solutions aux équations de Hartree-Fock. Les diverses solutions peuvent être atteintes en partant de diverses solutions de départ et en choisissant de façon appropriée dans l'étape c quelles sont les orbites occupées.

Le hamiltonien de Hartree-Fock(15)dépend explicitement de ses fonctions propres λ . Donc en général deux solutions des équations de Hartree-Fock ne sont pas orthogonales car leurs orbites ne sont pas fonctions propres du même hamiltonien. Pour décrire l'état fondamental du noyau on choisit évidemment la solution qui a l'énergie la plus basse.

Des modèles simples facilitent le choix de la solution de départ dans l'étape a . Par exemple nous montrerons au chapitre VII que les fonctions d'onde des orbites sont semblables à celles obtenues par une force quadrupole-quadrupole et que le hamiltonien Hartree-Fock est souvent bien approché par celui d'un oscillateur harmonique déformé. Par conséquent une bonne solution de départ est obtenue en choisissant des orbites (n_x, n_y, n_z) d'un oscillateur harmonique. Nous avons toujours trouvé que le processus itératif convergeait.

Le temps qu'il faut pour obtenir une solution numérique des équations de Hartree-Fock dépend de la possibilité de pouvoir stocker les éléments de matrice dans les mémoires rapides de l'ordinateur utilisé. Le calcul des éléments de matrice constitue la partie la plus longue du calcul et il faut éviter de les recalculer à chaque itération.

Il est commode pour la solution numérique des équations d'utiliser la matrice densité définie par l'équation :

$$\rho_{jj'} = \sum_{\lambda=1}^{A} C_j^\lambda \; C_{j'}^{\lambda *} \quad . \tag{16}$$

Cette matrice est calculée à chaque étape c . Les éléments de matrice (15) du hamiltonien de Hartree-Fock peuvent alors s'écrire :

$$\langle j|\, h\,|j'\rangle = \langle j|\, t\,|j'\rangle \sum_{j_1 j_2} R(jj' ; j_1 j_2)\ \rho_{j_2 j_1} \quad , \tag{17}$$

où :

$$R(jj' ; j_1 j_2) = \frac{1}{2}\left[\langle jj_1|\, v\,|j' j_2\rangle + \langle jj_2|\, v\,|j' j_1\rangle\right] \quad . \tag{18}$$

Dans le cas usuel où les éléments de matrice de l'interaction v sont réels R a les symétries suivantes :

$$R(jj' ; j_1 j_2) = R(j'j ; j_1 j_2) = R(jj' ; j_2 j_1) = R(j_1 j_2 ; jj') \quad . \tag{19}$$

Ces propriétés permettent de ne stocker que les éléments de matrice $R(jj' ; j_1 j_2)$ avec :

$$j \geq j' \quad ; \quad j_1 \geq j_2 \quad ; \quad j \geq j_1 \quad .$$

En outre les symétries du hamiltonien de Hartree-Fock décomposent la matrice densité en sous-matrices de sorte que les paires d'indices jj' et $j_1 j_2$ de R n'appartiennent chacun qu'à un sous-espace de l'espace des configurations j sur lequel on a développé les orbites. Dès lors que les éléments de matrice R sont stockés le calcul du hamiltonien de Hartree-Fock (17) est extrèmement rapide. Dans notre calcul le plus long, décrit dans le chapitre XIII, nous avons eu à stocker 6670 éléments de matrice. Il nous fallait quatre secondes de temps machine IBM 7094 pour effectuer les étapes b et c du processus itératif. A chaque fois 35 orbites étaient calculées.

CHAPITRE III

LES INVARIANCES DU HAMILTONIEN DE HARTREE-FOCK ET LE CHOIX D'UNE BASE POUR LE DÉVELOPPEMENT DES ORBITES

Le hamiltonien de Hartree-Fock (15) n'a pas les mêmes invariances que le hamiltonien nucléaire (7). En outre les invariances du hamiltonien de Hartree-Fock ne sont pas toujours conservées d'une itération à l'autre. Les invariances possibles du hamiltonien de Hartree-Fock sont données par le théorème suivant :

Théorème : Soit U un opérateur unitaire qui commute avec le hamiltonien nucléaire (7) :

$$U^{-1} H U = H \quad . \tag{20}$$

Si l'opérateur U laisse invariant le sous-espace sous-tendu par les orbites occupées, il commute avec le hamiltonien de Hartree-Fock (15)

$$U^{-1} h U = h \quad . \tag{21}$$

L'opérateur U laisse invariant le sous-espace sous-tendu par les orbites occupées lorsque l'état obtenu en appliquant l'opérateur U à l'une quelconque des orbites occupées est une combinaison linéaire des orbites occupées.

$$\bar{\varphi}_\lambda = U\varphi_\lambda = \sum_{\mu=1}^{A} X_\mu^\lambda \varphi_\mu \qquad \text{pour} \quad \lambda = 1,2,\ldots A \ .$$

$$\sum_{\lambda=1}^{A} X_\mu^{*\lambda} X_\nu^\lambda = \delta_{\mu\nu} \tag{22}$$

Puisque l'opérateur U commute avec le hamiltonien nucléaire H, le hamiltonien de Hartree-Fock (15) s'écrit :

$$\langle j|\, h\, |j'\rangle = \langle j|U^{-1}\, t\, U|j'\rangle + \sum_{\lambda=1}^{A} \langle j\lambda|U^{-1}\, v\, U|j'\lambda\rangle \quad .$$

A l'aide de l'équation (22) on obtient :

$$\langle j|\, h\, |j'\rangle = \langle \bar{j}|\, t\, |\bar{j}'\rangle + \sum_{\lambda=1}^{A} \langle \bar{j}\bar{\lambda}|\, v\, |\bar{j}'\bar{\lambda}\rangle$$

$$= \langle \bar{j}|\, t\, |\bar{j}'\rangle + \sum_{\lambda=1}^{A} \sum_{\mu,\nu=1}^{A} X_\mu^{\lambda *} \langle \bar{j}\mu|\, v\, |\bar{j}'\nu\rangle\, X_\nu^\lambda$$

$$= \langle \bar{j}|\, t\, |\bar{j}'\rangle + \sum_{\mu=1}^{A} \langle \bar{j}\mu|\, V\, |\bar{j}'\mu\rangle$$

$$= \langle \bar{j}|\, h\, |\bar{j}'\rangle$$

$$= \langle j|U^{-1} h\, U|j'\rangle \quad . \tag{23}$$

Ainsi l'équation (21) est démontrée. L'opérateur U commute avec le hamiltonien de Hartree-Fock.

Notons que dans la démonstration de ce théorème, les orbites λ peuvent être celles obtenues à n'importe quelle itération. L'invariance du hamiltonien de Hartree-Fock par rapport à la transformation U sera préservée d'une itération à l'autre à condition de pouvoir choisir après chaque itération un ensemble de A orbites qui sous-tendent un sous-espace invariant par la transformation U. A chaque transformation U il correspond une symétrie du champ moyen décrit par le hamiltonien de Hartree-Fock. Les symétriesdu champ moyen limitent le développement (10) des orbites.

Le choix d'une base pour le développement des orbites.

La base j sur laquelle on développe les orbites est en principe arbitraire. Mais l'utilité d'une base j dépend de la convergence du développement, de la facilité avec laquelle on peut calculer les éléments de matrice de l'interaction v et des symétries du champ moyen. La convergence a été étudiée dans le cas des noyaux sphériques[18]. Une excellente convergence a été obtenue en développant les orbites sur une base d'un oscillateur harmonique. Les orbites occupées, qui seules déterminent le champ moyen et l'état $|\Phi\rangle$, n'ont qu'un faible mélange d'états j appartenant à des couches majeures différentes. Nous utiliserons donc les fonctions d'onde d'un oscillateur harmonique pour la partie radiale des fonction de base j.

Les fonctions d'onde du modèle des couches

$$\varphi_j \equiv \varphi_{n\ell jm\tau} \tag{24}$$

constituent une base particulièrement utile parce qu'il est facile de calculer les éléments de matrice de l'interaction dans cette base (Appendice B) et parce qu'ils diagonalisent le terme spin-orbite du champ moyen. Les fonctions $\varphi_{n\ell jm\tau}$

sont obtenues en couplant le moment cinétique ℓ au spin 1/2 du nucléon pour former un moment cinétique total j :

$$\varphi_{n\ell jm\tau} = u_{n\ell}(r)\, \chi_\tau \sum_{m_\ell \sigma} \begin{bmatrix} \ell & 1/2 & j \\ m_\ell & \sigma & m \end{bmatrix} Y_{\ell m_\ell}(\Omega)\, \chi_\sigma \quad . \tag{25}$$

La définition des différents termes de l'équation (25) ainsi que la forme explicite des fonctions radiales $u_{n\ell}(\tau)$ se trouvent dans l'appendice A . Il nous suffit ici de préciser que :

- n est le nombre quantique principal (ou radial)
- ℓ est le moment cinétique orbital
- $j = \ell \pm 1/2$ est le moment cinétique total
- τ est un indice d'isospin qui distingue un proton d'un neutron.

En utilisant la base (24) le développement (10) des orbites s'écrit :

$$\varphi_\lambda = \sum_{jm} C^\lambda_{jm}\ \varphi_{jm\tau_\lambda} \quad . \tag{26}$$

Dans l'équation (26) ainsi que dans la suite, l'indice j désigne à la fois les trois nombres quantiques n, ℓ et j . Nous n'avons pas étudié le mélange d'états de neutron et de proton dans une orbite de sorte que le développement (26) est limité à des états ayant la même valeur de τ : nous distinguerons les orbites de neutrons et de protons. Les éléments de matrice du hamiltonien de Hartree-Fock (15) dans la base (26) s'écrivent :

$$\langle jm\tau |\, h\, | j'm'\tau \rangle = \langle jm\tau |\, t\, | j'm'\tau \rangle + \sum_{\lambda=1}^{A} \langle jm\tau, \lambda |\, v\, | j'm'\tau, \lambda \rangle \tag{27}$$

où :

$$\langle jm\tau,\lambda|\ v\ |j'm'\tau,\lambda\rangle = \sum_{j_1 m_1} \sum_{j_2 m_2} C^{\lambda}_{j_1 m_1} \langle jm\tau, j_1 m_1 \tau_\lambda |\ v\ | j'm'\tau, j_2 m_2 \tau_\lambda\rangle\ C^{\lambda}_{j_2 m_2} \quad . \tag{28}$$

L'élément de matrice non-couplé dans l'équation (28) peut s'exprimer à l'aide de coefficients Clebsch-Gordan et d'éléments de matrice couplés définis dans l'appendice B :

$$\langle jm\tau, j_1 m_1 \tau_\lambda |\ v\ | j'm'\tau, j_2 m_2 \tau_\lambda\rangle =$$

$$\sum_{JM} \sum_{TM_T} \begin{bmatrix} j & j_1 & J \\ m & m_1 & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j' & j_2 & J \\ m' & m_2 & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \tau & \tau_\lambda & M_T \end{bmatrix}^2 \langle jj_1 |\ v\ | j'j_2\rangle_{JT} \quad . \tag{29}$$

Les symétries du champ moyen limitent le développement (26) des orbites. Nous allons illustrer cela en considérant les symétries du champ moyen les plus fréquemment rencontrées dans les noyaux légers.

1 - Symétrie par rapport au renversement du temps.

Soit U l'opérateur renversement du temps. Avec notre choix de base (Appendice A), les états $\varphi_{jm\tau}$ se transforment de la façon suivante :

$$U\varphi_{n\ell jm\tau} = (-)^{\ell+j-m}\ \varphi_{n\ell j-m\tau} \quad . \tag{30}$$

Si pour chaque orbite occupée,

$$\varphi_\lambda = \sum_{n\ell jm} C^{\lambda}_{n\ell jm} \varphi_{n\ell jm\tau_\lambda} \quad , \tag{31}$$

l'orbite

$$\varphi_{\bar{\lambda}} = U\varphi_\lambda = \sum_{n\ell jm} C^{\lambda^*}_{n\ell jm\tau} (-)^{\ell+j-m} \varphi_{n\ell j-m\tau_\lambda} \tag{32}$$

est aussi occupée, l'opérateur renversement du temps U laisse invariant le sous-espace sous-tendu par les orbites occupées, le hamiltonien de Hartree-Fock commute avec U et les orbites φ_λ et $\varphi_{\bar{\lambda}}$ sont dégénérées. Les éléments de matrice de l'interaction v (Appendice B) sont réels et les coefficients $C^{\lambda}_{n\ell jm\tau}$ peuvent donc être choisis réels. Dans ce cas, l'opérateur U est équivalent au produit d'une rotation de π autour de l'axe y et de l'opérateur parité

$$U = e^{-i\pi J_y} P \quad ;$$

les développements des orbites φ_λ et $\varphi_{\bar{\lambda}}$ sont reliés par la relation :

$$C^{\bar{\lambda}}_{n\ell j-m\tau_\lambda} = (-)^{\ell+j-m} C^{\lambda}_{n\ell jm\tau_\lambda} \tag{33}$$

et l'état $|\Phi\rangle$ du système est un état propre de U :

$$U|\Phi\rangle = |\Phi\rangle \quad . \tag{34}$$

Nous verrons que les spectres observés suggèrent que les solutions les plus basses des noyaux pair-pairs ont la symétrie par rapport au renversement du temps.

2 - La parité.

Il existe toujours des solutions pour lesquelles la parité est un bon nombre quantique. Il suffit de limiter le développement (31) de chaque orbite à des états $\varphi_{n\ell jm\tau}$ tels que ℓ ait une parité donnée. Il n'existe pas encore de données expérimentales qui montrent l'existence d'états intrinsèques $|\Phi\rangle$ de parité mixte. En outre, les calculs faits jusqu'ici montrent que les solutions avec parité mixte ne sont obtenues qu'avec une force tenseur anormalement grande[36]. Par conséquent, nous limiterons le développement des orbites à des états de parité donnée.

3 - La symétrie axiale.

Il existe toujours des solutions ayant la symétrie axiale, c'est-à-dire telles que le hamiltonien de Hartree-Fock commute avec la composante J_z du moment cinétique sur l'axe z. On peut les obtenir en limitant le développement (31) de chaque orbite à des états qui ont la même valeur de m.

$$\varphi_\lambda = \sum_{n\ell j} C^\lambda_{n\ell j} \varphi_{n\ell j m_\lambda \tau_\lambda} \quad . \tag{35}$$

Les orbites portent alors l'indice m_λ, valeur propre de J_z :

$$J_z \varphi_\lambda = m_\lambda \varphi_\lambda$$

et l'état $|\Phi\rangle$ est également état propre de J_z :

$$J_z |\Phi_K\rangle = K |\Phi_K\rangle \qquad K = \sum_{\lambda=1}^{A} m_\lambda \quad .$$

Nous verrons dans le chapitre V que pour certains noyaux, le ^{24}Mg par exemple, la solution dont l'énergie est la plus basse n'a pas la symétrie axiale.

4 - La symétrie ellipsoïdale.

Les solutions des noyaux pair-pairs qui n'ont pas de symétrie axiale peuvent avoir la symétrie ellipsoïdale, c'est-à-dire la symétrie par rapport à une réflexion dans les plans (x,y) , (y,z) et (z,x) . La réflexion dans un plan est équivalente au produit de l'opération parité et d'une rotation de π autour d'un axe perpendiculaire au plan de symétrie :

$$U_1 = e^{-i\pi J_z} P \qquad U_2 = e^{-i\pi J_x} P \qquad U_3 = e^{-i\pi J_y} P \quad . \tag{36}$$

Avec des coefficients C^{λ}_{jm} réels, une solution avec symétrie ellipsoïdale est invariante par rapport au renversement du temps. Lorsque le développement (31) de chaque orbite est limité à des états $\varphi_{n\ell jm\tau}$ tels que $\ell+m+1/2$ ait une parité donnée, on obtient des orbites qui sont fonctions propres de U_1 et le champ moyen a la symétrie de réflexion dans le plan (x,y) . Chaque orbite φ_λ est alors orthogonale à l'orbite

$$\varphi_{\bar{\lambda}} = U_3 \varphi_\lambda = \sum_{n\ell jm} (-)^{\ell+j-m} C^{\lambda}_{n\ell jm} \varphi_{n\ell j-m\tau_\lambda} \tag{37}$$

et il suffit que les orbites φ_λ et $\varphi_{\bar{\lambda}}$ soient occupées pour que le hamiltonien de Hartree-Fock commute avec U_3 . Enfin le hamiltonien de Hartree-Fock commute aussi avec U_2 seulement si les orbites ont une parité donnée, car dans ce cas $U_2 = U_3 U_1$. L'état $|\Phi\rangle$ est alors vecteur propre de U_1, U_2 et U_3 :

$$U_1 |\Phi\rangle = U_2 |\Phi\rangle = U_3 |\Phi\rangle = |\Phi\rangle \quad . \tag{38}$$

Il est avantageux de choisir un développement des orbites tel que le champ moyen ait une symétrie ellipsoïdale car on assure ainsi que les axes x, y et z sont les axes principaux des tenseurs

$$x_i\, x_j \quad \text{et} \quad J_i\, J_j \quad ,$$

c'est-à-dire que

$$\langle \Phi | \, xy \, | \Phi \rangle = 0 \qquad \langle \Phi | \, J_x \, J_y \, | \Phi \rangle = 0 \quad \text{etc} \; . \tag{39}$$

On évite ainsi de confondre une solution sans symétrie axiale avec une solution $|\Phi_K\rangle$ avec symétrie axiale mais qui a subi une rotation quelconque. Cependant, on n'élimine pas la possibilité de trouver une solution avec une symétrie axiale autour des axes x ou y au lieu de l'axe z .

5 - Symétries dans l'espace de l'isospin.

Nous allons dès le début, limiter le développement de chaque orbite à des états soit de proton, soit de neutron. Le hamiltonien de Hartree-Fock commute alors avec la troisième composante de l'opérateur d'isospin. Lorsqu'un noyau a un nombre égal de protons et de neutrons $Z = N$, les protons et les neutrons peuvent occuper les mêmes orbites et le hamiltonien de Hartree-Fock commute alors avec les trois composantes de l'isospin, à condition de négliger les forces de Coulomb entre les protons. L'état $|\Phi\rangle$ est alors un état d'isospin nul :

$$\vec{T} \, |\Phi\rangle = 0 \quad .$$

Puisque nous ne considérons que les noyaux légers $(A \leq 40)$ nous traitons la force coulombienne au premier ordre des perturbations. Nous faisons ainsi l'hypothèse que la force de Coulomb ne change pas les fonctions d'onde des orbites

(voir chapitre IV). La solution $T = 0$ qui consiste à placer les protons et les neutrons dans les mêmes orbites est celle qui a l'énergie la plus basse.

6 - La symétrie sphérique.

Nous dirons qu'une solution est sphérique lorsque le hamiltonien de Hartree-Fock commute avec les trois composantes J_x, J_y et J_z du moment cinétique. Agissant sur un état $\varphi_{jm\tau}$ les opérateurs J_x et J_y augmentent et diminuent le nombre quantique m d'une unité.

Il est facile de montrer que le sous-espace sous-tendu par les orbites est invariant par rapport aux rotations autour des axes x et y lorsque les orbites se composent d'états φ_{jm} avec tous les états magnétiques occupés. L'état $|\Phi\rangle$ se compose donc de couches complètes et il a un moment cinétique nul :

$$J_x |\Phi\rangle = J_y |\Phi\rangle = J_z |\Phi\rangle = 0 \quad .$$

Pour une solution ayant une bonne parité le développement des orbites devient

$$\varphi_\lambda = \sum_n C_n^\lambda \varphi_{n\ell_\lambda j_\lambda m_\lambda \tau_\lambda} \quad . \tag{40}$$

On voit qu'il n'existe des solutions sphériques que pour les noyaux qui ont juste le nombre de nucléons qu'il faut pour remplir les couches de moment cinétique j. Dans tous les autres cas, le champ moyen Hartree-Fock est déformé.

7 - Invariances dans l'espace de spin et d'isospin.

Lorsque le hamiltonien nucléaire ne contient que des forces centrales, les orbites se factorisent en fonctions d'onde dans l'espace des configurations φ_{λ_x}, dans l'espace des spins χ_{σ_λ} dans l'espace de l'isospin χ_{τ_λ} :

$$\varphi_\lambda = \varphi_{\lambda_x} \chi_{\sigma_\lambda} \chi_{\tau_\lambda} \quad . \tag{41}$$

La fonction d'onde d'un noyau pair-pair ayant un nombre égal de neutrons et de protons peut alors être construite en plaçant quatre nucléons dans chaque orbite φ_{λ_x} et en formant des couches complètes de spin et d'isospin. L'état $|\Phi\rangle$ a ainsi un spin et un isospin nuls. En projetant l'état $|\Phi\rangle$ sur un sous-espace de moment cinétique donné, on obtient des fonctions d'onde dans le couplage L-S de spin nul. De plus, ces fonctions d'onde ont une symétrie spatiale maxima et elles minimisent l'énergie potentielle lorsque la force nucléon-nucléon a de fortes composantes d'échange (voir chapitre VI). Nous verrons dans le chapitre VIII que dans la mesure où l'interaction spin-orbite du champ moyen est faible par rapport aux forces centrales du hamiltonien nucléaire, les fonctions d'onde Hartree-Fock se rapprochent de la fonction d'onde $|\Phi\rangle$ ayant quatre nucléons dans chaque orbite de l'espace des configurations.

La signification des invariances du hamiltonien de Hartree-Fock et les effets des symétries du champ moyen sur les spectres des noyaux.

Le fait que le hamiltonien de Hartree-Fock n'a pas les mêmes symétries que le hamiltonien nucléaire nous conduit à poser la question de la signification des fonctions d'onde $|\Phi\rangle$ obtenues dans la théorie de Hartree-Fock. Sauf dans le cas des solutions sphériques qui correspondent à des couches complètes, les fonctions $|\Phi\rangle$ ne sont pas fonctions propres du moment cinétique $\vec{J}^2$ et J_z et par conséquent, elles ne peuvent décrire à elles seules les états du noyau qui ont un spin bien déterminé. On peut obtenir des états $|JM\rangle$, fonctions propres de $\vec{J}^2$ et de J_z en projetant la fonction d'onde $|\Phi\rangle$ sur le sous-espace d'états propres de $\vec{J}^2$ et de J_z :

$$|\Phi,JM\rangle = \frac{P_M^J |\Phi\rangle}{\sqrt{\langle\Phi| P_M^J |\Phi\rangle}} \quad . \tag{42}$$

Nous décrirons l'opérateur de projection P_M^J dans le chapitre XII.

Bien que la projection (42) soit toujours possible, la description d'un état nucléaire par la fonction d'onde $|\Phi,JM\rangle$ fait appel à un modèle nucléaire dont la validité n'est pas démontrée. Lorsqu'on obtient une fonction d'onde $|\Phi\rangle$ qui est très déformée et stable par rapport aux vibrations on s'attend à ce que le spectre du noyau se compose d'états collectifs qui correspondent à la rotation de l'état intrinsèque $|\Phi\rangle$ comme pour les molécules diatomiques. Ces états sont alors décrits par la fonction d'onde projetée (42). C'est de la possibilité de pouvoir décrire plusieurs états $|\Phi,JM\rangle$ à partir d'une seule fonction d'onde $|\Phi\rangle$ que dépend la signification des états déformés obtenus dans la théorie de Hartree Fock. On ne sait pas démontrer dans quels cas le modèle rotationnel doit s'appliquer. Mais il est assez riche en prédictions pour que les données expérimentales confirment ou infirment sa validité.

Il peut arriver que l'on obtienne une solution qui est faiblement déformée. Nous verrons dans le chapitre VIII qu'on obtient pour le ^{32}S des solutions qui sont presque sphériques. On peut douter dans ce cas que la théorie de Hartree-Fock soit la meilleure façon de décrire le mélange de configurations qui s'ajoute à la solution sphérique. La signification des petites déformations n'est pas certaine. Nous serons donc obligés de discuter la validité d'une solution de Hartree-Fock dans chaque noyau en analysant la stabilité de la fonction d'onde et en confrontant ses propriétés avec les résultats expérimentaux.

Les symétries du champ moyen peuvent éliminer un certain nombre d'états $|\Phi,JM\rangle$ des bandes de rotation obtenues à partir d'un état intrinsèque $|\Phi\rangle$. On peut développer $|\Phi\rangle$ sur des états de parité et de moment cinétique J^2 et J_z donnés :

$$|\Phi\rangle = \sum_{JK} \alpha_{JK} |\Phi, JK^{(+)}\rangle + \beta_{JK} |\Phi, JK^{(-)}\rangle$$

$$\vec{J}^2 |\Phi, JK^{(\pm)}\rangle = J(J+1) |\Phi, JK^{(\pm)}\rangle, \; J_z |\Phi, JK^{(\pm)}\rangle = K |\Phi, JK^{(\pm)}\rangle$$

$$P |\Phi, JK^{(\pm)}\rangle = \pm |\Phi, JK^{(\pm)}\rangle \quad . \tag{43}$$

Les états $|\Phi, JK^{(\pm)}\rangle$ sont ceux qui sont obtenus en projetant la fonction d'onde $|\Phi\rangle$. Considérons l'invariance par rapport au renversement du temps U. Pour les solutions obtenues avec des coefficients C_j^λ réels on a :

$$U |\Phi, JK^{(\pm)}\rangle = \pm (-)^{J-K} |\Phi, J-K^{(\pm)}\rangle \quad . \tag{44}$$

De sorte que la symétrie (34) par rapport au renversement du temps donne les relations suivantes :

$$\alpha_{J-K} = (-)^{J-K} \alpha_{JK} \qquad \text{et} \qquad \beta_{J-K} = -(-)^{J-K} \beta_{J-K} \quad . \tag{45}$$

Ainsi pour $K = 0$ on obtient des états 0^+, 2^+, 4^+, ... et 1^-, 3^-, 5^-, c'est-à-dire des états dits de parité naturelle. Les niveaux les plus bas des noyaux pair-pairs sont de parité naturelle ce qui suggère la symétrie du champ moyen par rapport au renversement du temps. Il est évident que l'existence d'états de parité naturelle n'implique nullement la validité du modèle rotationnel.

Le mélange de couches majeures

Les symétries du champ moyen ne limitent pas le développement (26) des orbites à des sommes finies. Pour cela il faut le limiter à un mélange d'un nombre fini de couches majeures. Les calculs faits jusqu'ici peuvent se diviser en deux classes :

1. Les calculs de Hartree-Fock dans une seule couche majeure : chaque orbite appartient à une couche majeure d'un oscillateur harmonique.

2. Les calculs de Hartree-Fock permettant le mélange de couches majeures.

Nous discuterons séparément les résultats de ces deux calculs.

CHAPITRE IV

LES CALCULS DE HARTREE-FOCK DANS UNE SEULE COUCHE MAJEURE

Un calcul de Hartree-Fock dans une couche majeure consiste à développer chaque orbite sur des états appartenant à une couche majeure ; le développement (26) des orbites est limité ainsi :

$$\varphi_\lambda = \sum_{jm} C^\lambda_{jm} \varphi_{jm\tau_\lambda}$$

avec

$j = 1\, s_{1/2}$ pour les orbites de la couche 1s

$j = 1\, p_{3/2}$ et $1\, p_{1/2}$ pour les orbites de la couche 1p

$j = 1\, d_{5/2}$, $2\, s_{1/2}$ et $1\, d_{3/2}$ pour les orbites de la couche 2s-1d

$j = 1\, f_{7/2}$, $2\, p_{3/2}$, $2\, p_{1/2}$ et $1\, f_{5/2}$ pour les orbites de la couche 2p-1f etc ... . (46)

Les solutions sphériques.

Il n'y a qu'un état de moment cinétique donné dans chaque couche majeure. Donc dans une solution sphérique, les restrictions (46) limitent le développement (40) des orbites à un seul terme. Le hamiltonien de Hartree-Fock est alors

diagonal dans la représentation $\varphi_{jm\tau}$. Pour un noyau qui a un nombre égal de neutrons et de protons on peut sommer les nombres magnétiques dans l'expression (27) du hamiltonien de Hartree-Fock et on obtient :

$$\langle jm\tau | h | j'm'\tau \rangle = \varepsilon_j \ \delta_{jj'} \ \delta_{mm'} \quad ,$$

avec :

$$\varepsilon_j = \langle jm | t | jm \rangle + \frac{1}{2(2j+1)} \sum_{j_\lambda} \sum_{JT} (2J+1)(2T+1) \langle jj_\lambda | v | jj_\lambda \rangle_{JT} \ . \quad (47)$$

Dans l'équation (47) la somme $\sum_{j_\lambda}$ est limitée aux nombres quantiques j_λ des orbites occupées seulement.

Les ε_j sont les énergies de particule indépendante dans le champ sphérique du noyau à couches complètes. Elles sont souvent utilisées dans le modèle des couches pour le calcul de mélange desconfigurations [37][38]. Les fonctions d'onde des orbites dans le champ sphérique sont les états de base $\varphi_{n\ell jm\tau}$ eux-mêmes.

En outre, si un noyau a des couches majeures entièrement remplies, comme l' ^{16}O et le ^{40}Ca par exemple, la solution sphérique est aussi la solution de Hartree-Fock du noyau pair-impair obtenu en ajoutant (ou en soustrayant) un nucléon au (ou du) noyau à couches complètes.

En effet, soit $|\Phi_o\rangle$ la solution sphérique du noyau à couches complètes. En ajoutant un nucléon dans une orbite inconnue μ on obtient l'état $b_\mu^\dagger |\Phi_o\rangle$, dont l'énergie est égale à

$$E_{HF} = \langle \Phi_o | b_\mu \, H \, b_\mu^\dagger | \Phi_o \rangle = E_o + \langle \mu | t | \mu \rangle + \sum_{\lambda \in \Phi_o} \langle \mu\lambda | v | \mu\lambda \rangle \quad ; \quad (48)$$

E_o est l'énergie de Hartree-Fock $\langle \Phi_o | H | \Phi_o \rangle$ du noyau à couches complètes. A cause du développement limité (46) des orbites λ , la somme $\sum_{\lambda \in \Phi_o}$ sur les orbites occupées dans l'état $|\Phi_o\rangle$ est indépendante des coefficients C_j^λ

En combinant les équations (47) et (48) on obtient

$$E_{HF} = E_o + \sum_{jm} |C_{jm}^{\mu}|^2 \varepsilon_j$$

et le problème variationnel (12) se réduit à l'équation :

$$(\varepsilon_j - e_\mu) C_j^\mu = 0 \quad .$$

Donc l'orbite μ est une des orbites φ_{jm} non-occupées du noyau à couches complètes. En effet, l'interaction du nucléon impair avec la couche complète ne peut que mélanger les états occupés de la couche complète entre eux ce qui laisse invariant le déterminant de Slater $|\Phi_o\rangle$. Ainsi le développement limité (46) ne permet pas la description de la polarisation des couches complètes.

L'utilisation d'un noyau à couches complètes de référence.

Puisqu'on connaît les fonctions d'onde des orbites des noyaux qui ont des couches majeures entièrement remplies, il est commode de les utiliser comme des noyaux de référence. Par exemple choisissons l' ^{16}O comme noyau de référence.

Dans l' ^{16}O les quatre orbites de la couche 1s et les douze orbites de la couche 1p sont occupées. Le remplissage des orbites dans un autre noyau peut être comparé au remplissage des orbites dans l' ^{16}O en écrivant la somme sur les orbites occupées dans l'équation (27) ainsi [14] :

$$\sum_{\lambda=1}^{A} = \sum_{\lambda=1s,1p} + \sum_{\mu=1}^{M} - \sum_{\nu=1}^{N} \quad . \qquad (49)$$

Les orbites μ sont les orbites qui sont occupées dans le noyau considéré mais vides dans l'^{16}O. Nous les appellerons les orbites de particule et elles appartiennent aux couches 2s-1d et aux couches supérieures. Les orbites ν, que nous appellerons les orbites de trou, sont vides dans le noyau considéré mais occupées dans l'^{16}O. Elles appartiennent aux couches 1p et 1s. Le ^{20}Ne se compose de $M = 4$ orbites de particule et d'aucune orbite de trou. Le ^{12}C se compose de $N = 4$ orbites de trou et d'aucune orbite de particule. Un état de parité négative du ^{19}F peut être construit avec $M = 4$ orbites de particule et $N = 1$ orbite de trou etc ... .

Les éléments de matrice (27) du hamiltonien de Hartree-Fock s'écrivent :

$$\langle jm\tau | h | j'm'\tau \rangle = \langle jm | t | j'm' \rangle + \sum_{\lambda \in 1s,1p} \langle jm\tau,\lambda | v | j'm'\tau,\lambda \rangle$$

$$+ \sum_{\mu=1}^{M} \langle jm\tau,\mu | v | j'm'\tau,\mu \rangle - \sum_{\nu=1}^{N} \langle jm\tau,\nu | v | j'm'\tau,\nu \rangle \quad . \qquad (50)$$

La première ligne de l'équation (50) est juste l'élément de matrice du hamiltonien de Hartree-Fock de la solution sphérique de l'^{16}O. On a donc :

$$\langle jm\tau | h | j'm'\tau \rangle = \varepsilon_j \, \delta_{jj'} \, \delta_{mm'} + \sum_{\mu=1}^{M} \langle jm\tau,\mu | v | j'm'\tau,\mu \rangle$$

$$- \sum_{\nu=1}^{N} \langle jm\tau,\nu | v | j'm'\tau,\nu \rangle \quad . \qquad (51)$$

Dans cette expression seules les orbites de particule et de trou apparaissent et l'énergie cinétique t est remplacée par les énergies de particule indépendante ε_j dans le champ sphérique de l'^{16}O . Par rapport à l'état sphérique $|\Phi_o\rangle$ de l'^{16}O l'état $|\Phi\rangle$ du noyau considéré peut s'écrire :

$$|\Phi\rangle = b^{\dagger}_{\mu_1} b^{\dagger}_{\mu_2} \dots b^{\dagger}_{\mu_M} b_{\nu_1} b_{\nu_2} \dots b_{\nu_N} |\Phi_o\rangle \quad , \tag{52}$$

et l'énergie de l'état Hartree-Fock $|\Phi\rangle$ s'écrit :

$$E_{HF} = E_o + \sum_{\mu} \langle \mu | K | \mu \rangle - \sum_{\nu} \langle \nu | K | \nu \rangle$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\mu\mu'} \langle \mu\mu' | v | \mu\mu' \rangle + \frac{1}{2} \sum_{\nu\nu'} \langle \nu\nu' | v | \nu\nu' \rangle - \sum_{\mu\nu} \langle \mu\nu | v | \mu\nu \rangle \quad , \tag{53}$$

où E_o est l'énergie de liaison du fondamental de l'^{16}O :

$$E_o = \langle \Phi_o | H | \Phi_o \rangle \quad ; \tag{54}$$

K est l'opérateur qui représente le champ sphérique de l'^{16}O et qui est défini par ses éléments de matrice :

$$\langle jm\tau | K | j'm'\tau \rangle = \varepsilon_j \, \delta_{jj'} \, \delta_{mm'} \quad . \tag{55}$$

On peut encore exprimer le hamiltonien de Hartree-Fock à l'aide de la matrice densité comme dans le chapitre II, à condition d'utiliser la matrice densité :

$$\rho^{(\tau)}_{j_1 m_1, j_2 m_2} - \rho^{o}_{j_1 m_1, j_2 m_2} = \sum_{\mu=1}^{M} C^{\mu}_{j_2 m_2} C^{\mu *}_{j_1 m_1} - \sum_{\nu=1}^{N} C^{\nu}_{j_2 m_2} C^{\nu *}_{j_1 m_1} \quad ,$$

où :

$$\rho^{o}_{j_1 m_1, j_2 m_2} = \sum_{\lambda \in 1s, 1p} C^{\lambda}_{j_2 m_2} C^{\lambda *}_{j_1 m_1} \quad , \qquad (56)$$

est la matrice densité de la solution sphérique de l'^{16}O .

Nous avons formulé le problème de Hartree-Fock en utilisant l'^{16}O comme noyau de référence. Cette formulation est adaptée à la description des noyaux de la couche 2s-1d selon laquelle ces noyaux se composent d'un coeur inerte d'^{16}O et de A-16 nucléons de valence qui occupent des orbites μ qui ont des composantes sur les états $1\,d_{5/2}$, $2\,s_{1/2}$ et $1\,d_{3/2}$ de la couche 2s-1d . La couche inerte de l'^{16}O ne sert qu'à produire un champ sphérique et toute la déformation est due aux nucléons de valence. Les calculs de Hartree-Fock de ce type sont des approximations à la diagonalisation du hamiltonien nucléaire (10) parmi les configurations des A-16 nucléons dans la couche 2s-1d . Ces calculs sont simples et ils nous apprennent beaucoup sur la structure des noyaux.

Le choix de l'intensité de l'interaction v , des énergies ε_j de particule indépendante et de la constante de l'oscillateur harmonique.

Dans un oscillateur harmonique les rayons quadratiques $\langle jm\tau | r^2 | jm\tau \rangle$ de tous les états appartenant à une même couche majeure sont égaux. Par conséquent dans un calcul de Hartree-Fock dans une couche majeure, le rayon quadratique moyen d'un noyau décrit par la fonction d'onde $|\Phi\rangle$ est indépendant des coefficients C^{λ}_{j} et ne dépend que de la constante $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ de l'oscillateur harmonique. Ainsi, pour chaque noyau, la constante α de l'oscillateur harmonique est déterminée par le rayon quadratique moyen qui est mesuré par la diffusion élastique des électrons.[20] Les valeurs de α pour chaque noyau sont données dans le tableau 1.

Nous avons montré que les états des noyaux pair - impairs ^{15}O et ^{17}O sont les états de base φ_{jm} . Par conséquent, les énergies de particule indépendante ε_j peuvent être obtenues par les différences d'énergie de liaison :

$$[^{17}O]_j - [^{16}O] = \varepsilon_j$$

$$= \langle \Phi_o | b_{jm\tau} H b^{\dagger}_{jm\tau} | \Phi_o \rangle - \langle \Phi_o | H | \Phi_o \rangle \quad ,$$

pour $j = 1\,d_{5/2}$, $2\,s_{1/2}$ et $1\,d_{3/2}$,

et

$$[^{16}O] - [^{15}O]_j = \varepsilon_j$$

$$= \langle \Phi_o | H | \Phi_o \rangle - \langle \Phi_o | b^{\dagger}_{jm\tau} H b_{jm\tau} | \Phi_o \rangle \quad ,$$

pour $j = 1\,p_{1/2}$ et $1\,p_{3/2}$. (57)

$[^{16}O]$ est l'énergie de liaison de ^{16}O . $[^{17}O]_j$ et $[^{15}O]_j$ sont respectivement les énergies de liaison d'un état de spin j de ^{17}O et de ^{15}O . En supposant que le fondamental $5/2^+$ et les états excités les plus bas $1/2^+$ et $3/2^+$ de ^{17}O et que le fondamental $1/2^-$ et l'état excité le plus bas $3/2^-$ de ^{15}O sont des états à une particule, on obtient les énergies ε_j suivantes dans la couche 2s-1d et dans la couche 1p :

$$\varepsilon_{d_{5/2}} = -\ 4{,}14\ \text{MeV} \qquad \varepsilon_{s_{1/2}} = -\ 3{,}27\ \text{MeV} \qquad \varepsilon_{d_{3/2}} = 0{,}94\ \text{MeV}$$

$$\varepsilon_{p_{1/2}} = -\ 15{,}67\ \text{MeV} \qquad \varepsilon_{p_{3/2}} = -\ 21{,}83\ \text{MeV} \quad . \qquad (58)$$

Lorsqu'on écrit le hamiltonien de Hartree-Fock dans la forme (51) on a l'avantage de pouvoir utiliser les valeurs expérimentales (58) des énergies ε_j . En effet, la plupart des calculs se font avec des forces nucléon-nucléon simples qui ne donnent pas les valeurs expérimentales des ε_j lorsqu'elles sont calculées explicitement par l'expression (47). Par exemple, on n'obtient pas de terme spin-orbite avec des forces centrales dans le champ sphérique d'un noyau ayant des couches majeures remplies. On espère que l'utilisation des valeurs expérimentales des énergies ε_j compense dans une certaine mesure les effets des termes manquant dans l'interaction nucléon-nucléon utilisée, ainsi que quelques-uns des effets des restrictions (46).

Il faut néanmoins se rappeler que les énergies ε_j utilisées dans le calcul du hamiltonien de Hartree-Fock (51) représentent les valeurs de l'expression (47) calculées avec la constante α de l'oscillateur harmonique du noyau considéré. Les valeurs expérimentales (58) représentent celles obtenues avec la valeur de α de l'^{16}O . Lorsque α varie d'un noyau à l'autre les ε_j varient aussi et on peut rendre compte de cet effet en considérant la solution sphérique du ^{40}Ca . Les énergies e_j des orbites dans le champ sphérique du ^{40}Ca sont :

$$e_j = \varepsilon_j + \sum_{\mu=1}^{24} \langle jm\tau,\mu | v | jm\tau,\mu \rangle \quad . \tag{59}$$

Dans le ^{40}Ca toutes les orbites μ de la couche 2s-1d sont remplies de sorte que les énergies e_j sont indépendantes des coefficients C_j^μ . Les valeurs expérimentales des énergies e_j peuvent être estimées à partir des expériences (p , d) sur le ^{40}Ca [21] :

$$e_{d_{5/2}} = -21{,}73 \text{ MeV} \qquad e_{s_{1/2}} = -18{,}20 \text{ MeV} \qquad e_{d_{3/2}} = -15{,}73 \text{ MeV} \quad . \tag{60}$$

Supposons qu'on ait choisi une interaction nucléon-nucléon $V_o v$ dont l'intensité V_o seule reste à déterminer. La différence entre les énergies de liaison du ^{40}Ca et de l'^{16}O est donnée par l'équation :

$$[^{40}Ca] - [^{16}O] = 2\sum_{j} (2j+1)\varepsilon_j + \frac{1}{2} V_o \sum_{\mu\mu'=1}^{24} \langle \mu\mu' | v | \mu\mu' \rangle$$

$$= - 274 \text{ MeV} \quad . \tag{61}$$

La valeur expérimentale est donnée dans le tableau 6. L'équation (59) s'écrit :

$$e_j = \varepsilon_j + V_o \sum_{\mu=1}^{24} \langle jm\tau,\mu | v | jm\tau,\mu \rangle \quad . \tag{62}$$

Les équations (61) et (62) forment un système linéaire qui peut être résolu pour les inconnues ε_j et V_o . Dans ces équations la valeur de α du ^{40}Ca doit être utilisée et on obtient les ε_j qui correspondent à cette valeur de α .

Par exemple, si on choisit une force de Rosenfeld :

$$v = V_o \, e^{-(r/\mu)^2} \, \frac{\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2}{3} \, [0{,}3 + 0{,}7 \, \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2] \quad , \tag{63}$$

avec une portée $\mu = 1{,}48$fm, les équations (61) et (62) donnent une intensité $V_o = 70{,}82$ MeV et les énergies ε_j suivantes qui doivent être utilisées dans le ^{40}Ca :

$$\varepsilon_{d_{5/2}} = - 6{,}19 \text{ MeV} \quad \varepsilon_{s_{1/2}} = - 3{,}22 \text{ MeV} \quad \varepsilon_{d_{3/2}} = - 0{,}25 \text{ MeV} \quad . \tag{64}$$

Les valeurs (64) des énergies ε_j dans le ^{40}Ca ne diffèrent pas beaucoup de leurs valeurs (58) dans le ^{16}O .

Il est raisonnable de les extrapoler linéairement pour les valeurs de α dans les noyaux intermédiaires. Les valeurs obtenues pour chaque noyau lorsqu'on utilise la force de Rosenfeld (63) sont données dans le tableau 2. Cette méthode a l'avantage de faire jouer à l'^{16}O et au ^{40}Ca des rôles compatibles de noyaux de référence.

Si, au lieu d'une force de Rosenfeld on utilise une force de Serber:

$$v = V_o e^{-(r/\mu)^2} \frac{1}{8} [3 - \vec{\sigma}_1 . \vec{\sigma}_2 - \vec{\tau}_1 . \vec{\tau}_2 - (\vec{\sigma}_1 . \vec{\sigma}_2)(\vec{\tau}_1 \vec{\tau}_2)] , \qquad (65)$$

avec la même portée $\mu = 1,48$fm, les équations (61) et (62) donnent une intensité $V_o = - 35$ MeV et les énergies suivantes qui doivent être utilisées dans le ^{40}Ca :

$$\varepsilon_{d_{5/2}} = - 8,16 \text{ MeV} \quad \varepsilon_{s_{1/2}} = - 4,97 \text{ MeV} \quad \varepsilon_{d_{3/2}} = - 2,16 \text{ MeV} . \qquad (66)$$

Il n'y a pas de variations radiales dans les calculs de Hartree-Fock dans une couche majeure. Ils évitent par conséquent le problème du rayon d'équilibre. Mais les solutions dépendent fortement des termes d'échange de la force nucléon-nucléon. Nous montrerons dans le chapitre VI que les solutions des noyaux pair - pairs $N = Z$ dépendent essentiellement des deux combinaisons suivantes des termes d'échange :

$$S = 4W + 2B - 2H - M \quad \text{et} \quad G = W + 2B - 2H - 4M . \qquad (67)$$

W, B, M et H sont les intensités des composantes Wigner, Bartlett, Heisenberg et Majorana de l'interaction écrite dans la forme :

$$v = e^{-(r/\mu)^2} [W + BP_\sigma - HP_\tau + MP_x]$$

$$P_\sigma = \frac{1 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2}{2} \quad , \quad P_\tau = \frac{1 + \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2}{2} \quad , \quad P_x = - P_\sigma P_\tau \quad . \qquad (68)$$

Nous montrerons que pour une énergie de liaison donnée on n'obtient de grandes lacunes en énergie entre les orbites vides et occupées qu'avec de grandes valeurs de G par rapport aux valeurs de S .

Les données expérimentales du tableau 6 montrent que les lacunes en énergie sont grandes, de sorte que dans cette théorie, l'utilisation d'une force de Rosenfeld pour laquelle $S = 0$ et $G > 0$ est préférable à l'utilisation d'une force de Serber pour laquelle $S = -G$ et qui donne de faibles lacunes en énergie (Figure 4).

CHAPITRE V

RÉSULTATS DES CALCULS DE HARTREE-FOCK DANS UNE COUCHE MAJEURE POUR LES NOYAUX PAIR-PAIRS N = Z

Dans ce chapitre, nous donnons les fonctions d'onde et les énergies des orbites obtenues pour les noyaux pair-pairs $N = Z$ en diagonalisant le hamiltonien de Hartree-Fock (51).

Les orbites ont une dégénérescence d'ordre 4 à cause des symétries discutées dans le chapitre III. Les neutrons et les protons occupent les mêmes orbites et chaque orbite est dégénérée avec l'orbite obtenue par renversement du temps. Nous avons négligé l'interaction coulombienne. Tant que son effet se limite à élever toutes les orbites de proton d'une même énergie au-dessus des orbites de neutron, elle ne change pas les fonctions d'onde des orbites[10]. Nous avons utilisé la force de Rosenfeld (64) ainsi que les énergies de particule indépendante ε_j données dans le tableau 2. Pour tous les noyaux nous avons utilisé les énergies ε_j de la couche 1p données par l'équation (58). Nous avons classé les résultats d'après les symétries des solutions. Pour chaque symétrie nous ne donnons que la solution ayant l'énergie la plus basse. Les autres solutions sont discutées dans le chapitre IX.

a - Les solutions sphériques. Elles sont données dans le tableau 3. Il suffit de donner les énergies des orbites puisque leurs fonctions d'onde sont les états de base $\varphi_{n\ell jm\tau}$. Nous ne donnons pas les solutions sphériques du ^{20}Ne et du ^{24}Mg parce qu'elles ont une énergie beaucoup plus élevée et parce qu'elle ne présentent pas d'intérêt particulier.

b - Les solutions de symétrie axiale. Elles sont données dans le tableau 4. Le développement (35) des orbites dans un champ de symétrie axiale permet d'indiquer pour chaque orbite la composante m_λ du moment cinétique sur l'axe z . Nous donnons deux solutions pour le ^{28}Si et le ^{32}S, l'une de forme allongée (moment quadrupolaire positif) et l'autre de forme aplatie (moment quadrupolaire négatif). La quasi-dégénérescence de ces solutions sera discutée plus bas.

c - Les solutions de symétrie ellipsoïdale. Pour le ^{24}Mg et le ^{32}S, elles correspondent à la solution d'énergie la plus basse[12]. Il n'est plus possible d'indiquer la valeur de m_λ pour chaque orbite car J_z ne commute plus avec le hamiltonien Hartree-Fock. Afin d'assurer la symétrie ellipsoïdale (38) les orbites de la couche 2s-1d doivent être développées sur les états suivants :

$$d^{5/2}_{-3/2}\ ,\ d^{5/2}_{1/2}\ ,\ d^{5/2}_{5/2}\ ,\ 2s^{1/2}_{1/2}\ ,\ d^{3/2}_{1/2}\ \text{et}\ d^{3/2}_{-3/2}\ . \qquad (69)$$

L'orbite φ^-_λ obtenue par renversement du temps :

$$\varphi^-_\lambda = e^{-i\pi J_y}\,\varphi_\lambda = \sum_{jm} C^\lambda_{jm}\,(-)^{j-m}\,\varphi_{j-m}\ , \qquad (70)$$

est orthogonale à l'orbite φ_λ développée sur les états (69). En outre, nous avons montré dans le chapitre III que les axes x, y et z deviennent ainsi les axes principaux du champ moyen. Les solutions de symétrie ellipsoïdale pour le ^{24}Mg et le ^{32}S sont données dans le tableau 5 .

La lacune en énergie et le spectre des orbites.

La figure 1 montre les spectres des orbites des solutions qui ont l'énergie la plus basse pour chaque noyau. Il faut remarquerla constance

du niveau de Fermi c'est-à-dire de l'orbite occupée la plus haute en énergie et la grande lacune en énergie qui sépare les orbites occupées des orbites vides. La fonction d'onde du niveau de Fermi varie constamment d'un noyau à l'autre. Dans le ^{12}C et le ^{16}O le niveau de Fermi est une orbite de la couche 1p et du ^{20}Ne au ^{40}Ca le niveau de Fermi est une orbite de la couche 2s-1d. Les noyaux pair - impairs qui ont un nucléon en plus ou en moins des noyaux pair - pairs $N = Z$ peuvent dans une première approximation être décrits par une fonction d'onde d'une particule ou d'un trou dans une orbite du noyau pair-pair A :

$$|\Phi_\mu\rangle = b_\mu^\dagger |\Phi\rangle \qquad \text{pour le noyau } A+1$$

$$|\ _\lambda\rangle = b_\lambda |\Phi\rangle \qquad \text{pour le noyau } A-1 \quad , \tag{71}$$

$|\Phi\rangle$ est l'état de Hartree-Fock (52) du noyau pair-pair. Dans cette description, les différences entre les énergies de liaison des noyaux pair - pairs et pair - impairs sont :

$$E(A+1) - E(A) = e_\mu \qquad E(A) - E(A-1) = e_\lambda \quad . \tag{72}$$

Ainsi les énergies de séparation de neutron du noyau pair-pair A et du noyau pair-impair $A+1$ sont respectivement égales aux énergies du niveau de Fermi et de l'orbite vide la plus basse. La lacune en énergie est donc donnéepar :

$$G = E(A-1) - E(A) - [E(A) - E(A+1)] \quad . \tag{73}$$

Le tableau 6 donne les valeurs expérimentales des énergies de liaison, du niveau de Fermi et de la lacune en énergie définis par les équations (72) et (73). Le tableau 7 donne ces mêmes valeurs pour les solutions des équations de Hartree-Fock ayant l'énergie la plus basse. Notons que la description (60) des noyaux pair -

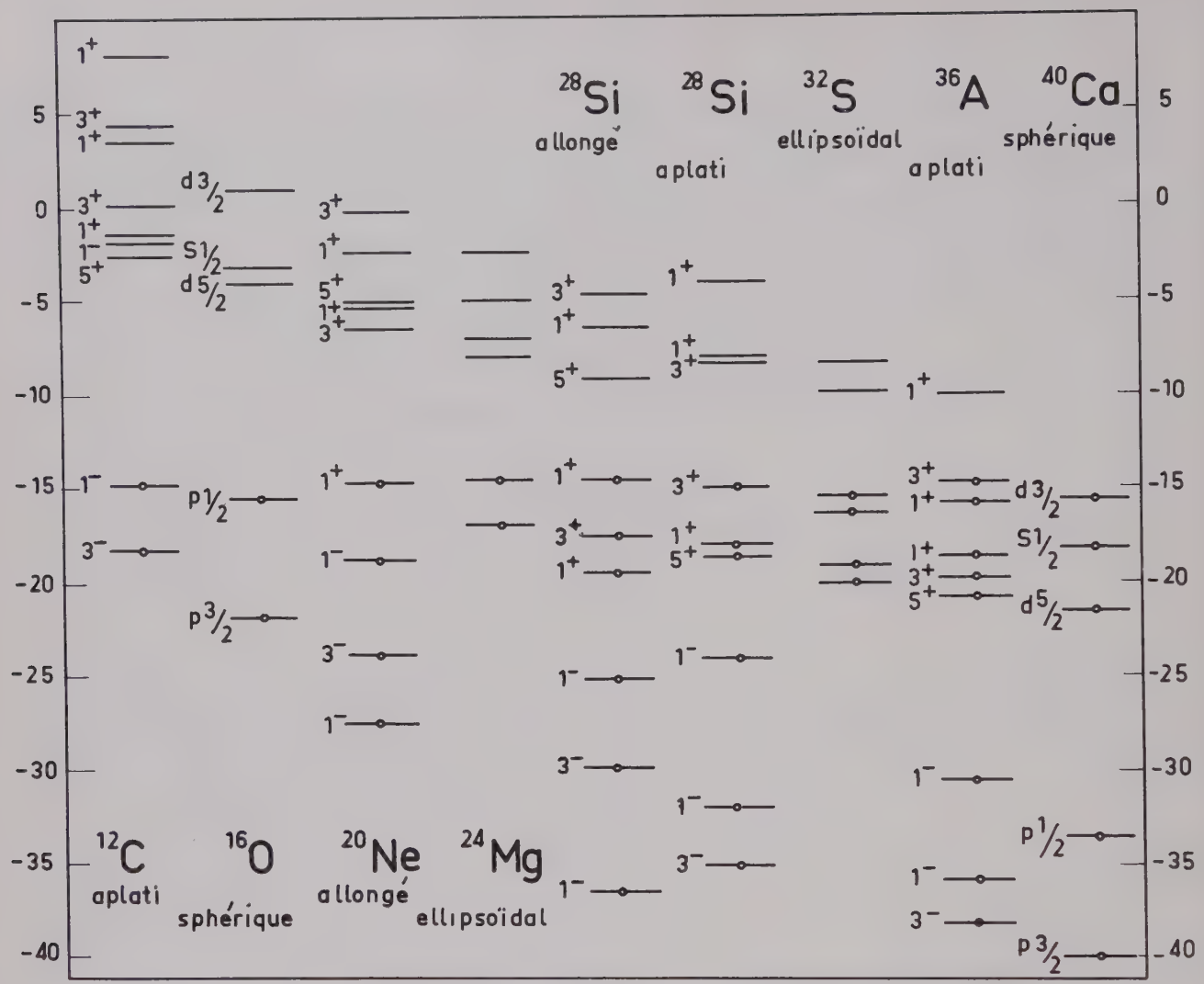


FIGURE 1

Le spectre des orbites des solutions de Hartree-Fock d'énergie la plus basse dans les noyaux pair-pairs N = Z du ^{12}C au ^{40}Ca. Les orbites sont quatre fois dégénérées. Les orbites occupées sont indiquées par un gros point. Les autres symétries sont indiquées, ainsi que la forme (allongée, aplatie ou sphérique) des solutions ayant la symétrie axiale. Les orbites de celles-ci sont dénotées par $(2k)^{\pi}$: par exemple 3^+ dénote une orbite K = 3/2 de parité positive de la couche 2s-1d et 1^- dénote une orbite K = 1/2 de parité négative de la couche 1p. Pour les solutions ellipsoïdales seules les orbites de la couche 2s-1d sont dessinées.

impairs ne peut être qu'une approximation assez grossière. Par exemple, le problème du moment cinétique a été complètement négligé. Une comparaison entre les tableaux 6 et 7 montre que la constance du niveau de Fermi est fort bien vérifiée expérimentalement. L'accord pour les énergies de liaison n'est qu'une illustration des propriétés de saturation de la force de Rosenfeld (voir le chapitre VI). Le tableau 6 montre que la lacune en énergie est une fonction qui décroît lentement avec le nombre A de nucléons du noyau. Les calculs de Hartree-Fock donnent une lacune en énergie qui est un peu plus petite et qui décroît un peu plus vite que les valeurs expérimentales. Les calculs montrent que la lacune en énergie est diminuée par l'interaction spin-orbite du champ de l'^{16}O qui sépare les états $d_{5/2}$ et $d_{3/2}$. Nous verrons dans le chapitre VI que la lacune est augmentée par l'intensité de la composante Majorana de la force nucléon-nucléon. A mesure que le nombre de nucléons augmente, la lacune en énergie diminue parce que les éléments de matrice de l'interaction v diminuent à cause de la croissance du volume du noyau tandis que l'interaction spin-orbite augmente quelque peu. Dans la seconde moitié de la couche 2s-1d l'interaction spin-orbite est du même ordre de grandeur que la lacune en énergie et nous verrons que les solutions déformées de Hartree-Fock ne rendent pas bien compte des propriétés des noyaux dans cette région. On pense en effet que la lacune en énergie rend plus difficile l'excitation de vibrations particule-trou par la rotation de la fonction d'onde $|\Phi\rangle$. La validité du modèle rotationel dans la seconde moitié de la couche 2s-1d est discutable.

Une comparaison entre les solutions sphériques et déformées données par les tableaux 3 et 4 favorise les solutions déformées pour le ^{12}C et le ^{28}Si. En effet, les solutions déformées ont respectivement 7,5 et 8 MeV de plus d'énergie de liaison. Les lacunes en énergie des solutions sphériques du ^{12}C et du ^{28}Si sont respectivement 4,82 MeV et 5,43 MeV. Ces valeurs sont très inférieures aux valeurs expérimentales du tableau 6. Dans une solution sphérique, la lacune est l'énergie qui sépare les états $p_{3/2}$ et $p_{1/2}$ dans le ^{12}C et qui sépare les états $d_{5/2}$ et $2s_{1/2}$ dans le ^{28}Si. Dans les calculs qui supposent que le ^{12}C et le ^{28}Si sont des noyaux à couches complètes, on est conduit à utiliser des énergies expérimentales des états $p_{3/2}$ et $p_{1/2}$ dans le ^{12}C, et des états $d_{5/2}$ et $2s_{1/2}$ dans le ^{28}Si qui sont séparées de 13,77 MeV et 8,69 MeV respec-

tivement. En utilisant des forces raisonnables, ces séparations sont incompatibles avec celles qui sont observées dans l' ^{15}O et l' ^{16}O . Par contre, les solutions déformées Hartree-Fock permettent d'obtenir des lacunes d'énergie en bon accord avec l'expérience en utilisant les énergies ε_j observées dans l' ^{15}O et l' ^{17}O . Notons enfin que si le ^{12}C et le ^{28}Si étaient des noyaux à couches complètes, leur premier état excité 2^+ serait une vibration particule-trou. A cause de la grande lacune en énergie expérimentale, il est difficile d'obtenir une énergie assez basse pour le 2^+ avec des configurations particule-trou[37]. Dans le chapitre XII, nous verrons qu'on obtient facilement des états 2^+ assez bas avec les solutions déformées.

Etats excités déformés des noyaux sphériques.

Des bandes de rotation ont été observées[39] parmi les états excités de ^{16}O . En particulier, les états 0^+(6,05 MeV), 2^+(6,92 MeV), 4^+(10,36 MeV) et 6^+(~ 15 MeV) et les états 1^-(9,59 MeV), 3^-(11,63 MeV) et 5^-(~ 15 MeV) semblent former des bandes de rotation $K = 0^+$ et $K = 0^-$ de parités positive et négative respectivement.

Les configurations particule-trou de parité positive[40] ne peuvent pas former des états excités d'énergie aussi basse, car pour les créer, un nucléon doit faire le saut de deux couches majeures (les états de deux couches majeures voisines sont de parité opposée). Les configurations particule-trou de parité négative[37] peuvent expliquer les états 3^-(6,13 MeV), 1^-(7,12 MeV), 2^-(8,88 MeV) mais il n'en reste plus à cette énergie pour expliquer les états qui forment la bande de rotation $K = 0^-$.

Les configurations de deux particules-deux trous (2p-2t) donnent des états de parité positive à environ 12-15 MeV d'excitation[41]. Une forte interaction résiduelle particule-particule et particule-trou (surtout pour les configurations qui se composent d'une paire de particules et d'une paire de trous chacune couplée à un isospin $T = 1$)[42] abaisse les états 2p-2t à environ 10 MeV

au-dessous de leur énergie non-perturbée qui est de 23 MeV. Mais les configurations p-t et 2p-2t ne suffisent pas à expliquer les transitions électromagnétiques observées entre les états excités de ^{16}O [43]. On sait depuis très longtemps[44] que les interactions résiduelles peuvent considérablement abaisser l'énergie des configurations 4p-4t par rapport à leur énergie non-perturbée de 46 MeV. Ceci a été démontré[14] en diagonalisant le hamiltonien de Hartree-Fock (51) dans ^{16}O en prenant $M = 4$ particules dans la couche 2s-1d et $N = 4$ trous dans la couche 1p .

Sur la Figure 2B on a tracé, en fonction de l'intensité V_o de l'interaction résiduelle (63), les énergies de Hartree-Fock de deux solutions 4p-4t et de deux solutions 2p-2t . Les deux solutions 4p-4t correspondent à des formes allongées et aplaties ; elles ont respectivement un moment quadrupolaire positif et négatif. On voit qu'un état à 6 MeV est plutôt formé par des configurations 4p - 4t que par des configurations 2p-2t . La Figure 2B montre aussi le spectre des orbites des solutions 4p-4t . On voit l'orbite occupée $1/2^+$ de la couche 2s-1d s'abaisser au-dessous de l'orbite vide $1/2^-$ de la couche 1p . Ainsi les niveaux de Fermi de la solution déformée et de la solution sphérique sont très voisines. La lacune en énergie de la solution déformée suggère que la solution 4p-4t est une autre forme d'équilibre de ^{16}O . Des calculs récents[45] ont montré qu'il existait une meilleure solution 4p-4t de symétrie ellipsoïdale mais non-axiale, ainsi que le prévoient les calculs[6] basés sur le schéma SU3 de la classification des états d'un oscillateur harmonique (voir les chapitres VII et XIII). Un état de symétrie ellipsoïdale mais non-axiale donne lieu en outre à une bande $K = 2$ et les états 2^+(9,85 MeV) et 3^+(11,08 MeV) appartiendraient à cette bande de rotation.

Les transitions électromagnétiques entre les états excités de ^{16}O ne peuvent s'expliquer qu'en introduisant un mélange entre les états 4p-4t , 2p-2t, p-t et le fondamental formé par une couche complète 1p . Les calculs qui ont estimé ce mélange[23][46] montrent que les états 0^+(6,05 MeV), 2^+(6,92 MeV) et 4^+(10,36 MeV) ont une forte composante 4p-4t . Le mélange entre les différentes

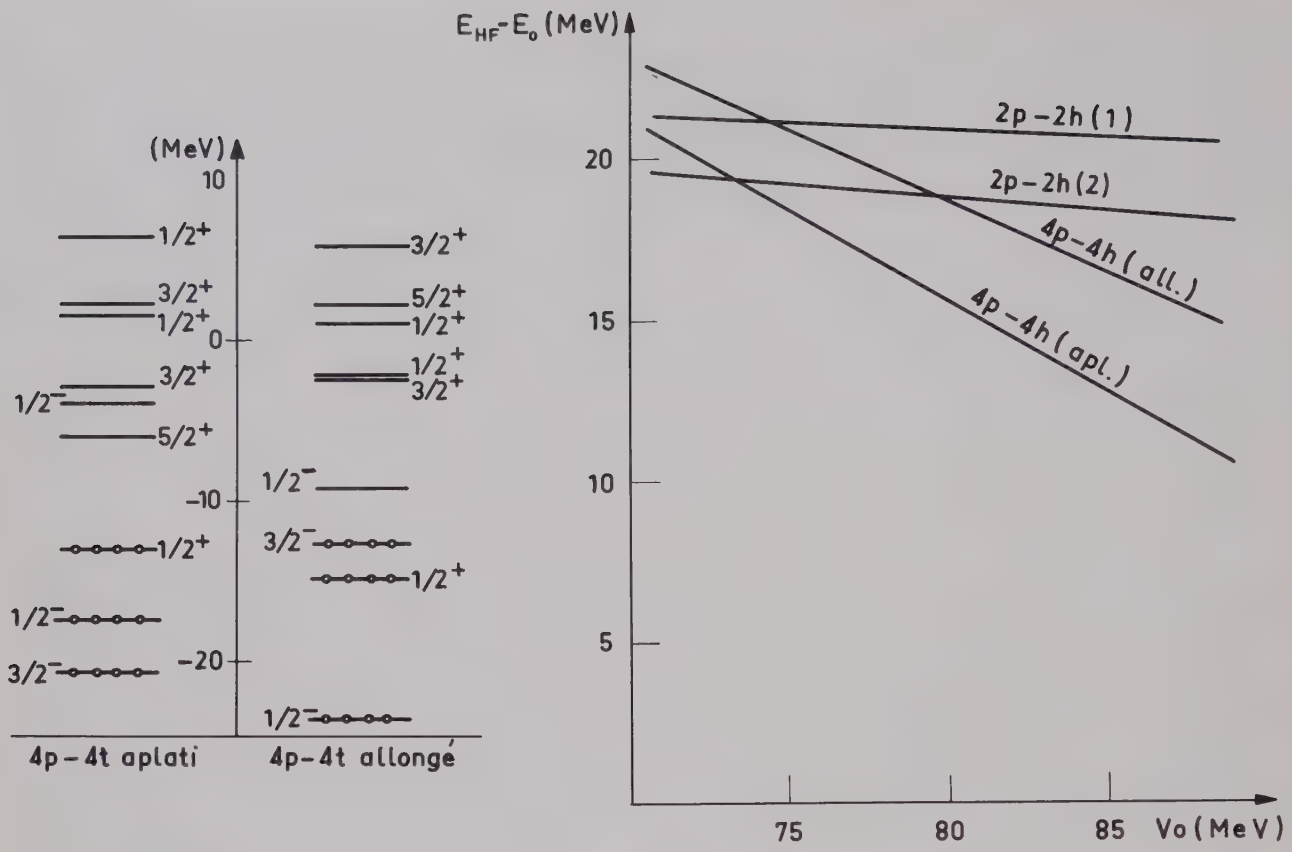


FIGURE 2

Variation de l'énergie de Hartree-Fock des états 2p-2t et 4p-4t en fonction de l'intensité Vo de la force de Rosenfeld (63). Les énergies sont exprimées par rapport au fondamental (couches complètes 1s et 1p). L'état 2p-2t (1) est composé de deux protons dans l'orbite $m_\lambda = 1/2^+$ et de deux trous de proton dans l'orbite $m_\lambda = 1/2^-$. L'état 2p-2t (2) est composé d'un neutron et d'un proton dans l'orbite $m_\lambda = 1/2^+$, d'un trou de neutron et d'un trou de proton dans l'orbite $m_\lambda = 1/2^-$. Le début de la bande 4p-4t est à environ 4 MeV au-dessous de l'énergie de Hartree-Fock. En dessous les spectres des orbites pour les solutions aplatie et allongée 4p-4t. Les gros points dénotent les orbites occupées.

formes d'équilibre d'un noyau est un effet extrèmement important pour les transitions électromagnétiques. Cet effet n'est pas encore bien compris et ne sera pas traité dans cette étude. La théorie de Hartree-Fock des états excités déformés a également été appliquée à ^{18}O et à ^{19}F [15] .

Avec la méthode de projection du moment cinétique (Chapitre XII) on obtient en particulier un bon accord pour le spectre des états de parité positive et négative du ^{19}F qui appartiennent à des bandes de rotations $K = 1/2^+$ et $K = 1/2^-$ formées par des configurations de 3p et de 4p-1t .

CHAPITRE VI

UN MODÈLE SOLUBLE : LES EFFETS DES COMPOSANTES D'ÉCHANGE DE LA FORCE NUCLÉON-NUCLÉON

Nous pouvons comprendre un certain nombre de résultats des calculs de Hartree-Fock en considérant une interaction nucléon-nucléon qui n'a pas de dépendance radiale

$$v = W + BP_{\sigma} - HP_{\tau} + MP_{x} \tag{74}$$

et une couche 2s-1d dégénérée dans laquelle les trois énergies ε_j ont la valeur commune ε [10][11].

Nous avons montré dans le chapitreIII qu'en absence d'interaction spin-orbite, les fonctions d'onde des orbites se factorisent en produit de fonctions d'onde dans l'espace des configurations, de spin et d'isospin :

$$\varphi_{\lambda} = \varphi_{\lambda_x} \chi_{\sigma_\lambda} \chi_{\tau_\lambda} \cdot \tag{75}$$

L'interaction modèle (74) ne peut pas déterminer les fonctions spatiales φ_{λ_x}, car le hamiltonien de Hartree-Fock est diagonal dans n'importe quelle représentation orthonormale de fonctions dans l'espace des configurations. Les éléments de matrice de l'interaction se réduisent à des recouvrements de fonctions d'onde

spatiales et de spin, de sorte qu'on obtient facilement l'expression suivante pour l'énergie e_α d'une orbite :

$$
\begin{aligned}
e_\alpha &\equiv \langle \alpha_x \, \sigma_\alpha \, \tau_\alpha | \, h \, | \alpha_x \, \sigma_\alpha \, \tau_\alpha \rangle \\
&= \varepsilon + W \sum_\lambda \left[1 - (\alpha_x | \lambda_x)^2 \, \delta_{\sigma_\lambda, \sigma_\alpha} \quad \delta_{\tau_\lambda, \tau_\alpha} \right] \\
&\quad + B \sum_\lambda \left[\delta_{\sigma_\alpha, \sigma_\lambda} - (\alpha_x | \lambda_x)^2 \quad \delta_{\tau_\alpha, \tau_\lambda} \right] \\
&\quad - H \sum_\lambda \left[\delta_{\tau_\alpha, \tau_\lambda} - (\alpha_x | \lambda_x)^2 \quad \delta_{\sigma_\alpha, \sigma_\lambda} \right] \\
&\quad + M \sum_\lambda \left[(\alpha_x | \lambda_x)^2 - \delta_{\sigma_\lambda, \sigma_\alpha} \quad \delta_{\tau_\lambda, \tau_\alpha} \right] \quad , \qquad (76)
\end{aligned}
$$

$(\alpha_x | \lambda_x)$ est le recouvrement de la fonction spatiale d'une orbite α avec la fonction spatiale d'une orbite occupée λ . Les sommes sont limitées aux orbites occupées. L'équation (76) permet de vérifier que si chaque orbite φ_{λ_x} est occupée par quatre nucléons (Figure 3), on obtient une solution telle que toutes les orbites λ occupées sont dégénérées à l'énergie

$$e_\lambda = \varepsilon + \frac{SA}{4} - G \qquad \text{(orbites occupées)}$$

et que toutes les orbites vides sont dégénérées à l'énergie

$$e_\alpha = \varepsilon + \frac{SA}{4} \qquad \text{(orbites vides)} \quad . \tag{77}$$

A représente le nombre de nucléons dans la couche ε . S et G sont des combinaisons linéaires de W, B, H et M :

$$S = 4W + 2B - 2H - M$$

$$G = W + 2B - 2H - 4M \quad . \tag{78}$$

On voit que les orbites occupées sont séparées des orbites vides par une lacune en énergie égale à G . La constance du niveau de Fermi e_λ est assurée par la condition "de saturation" $S = 0$ qui est vérifiée pour la force de Rosenfeld. L'énergie Hartree-Fock du système est

$$E_{HF} = A\varepsilon + \frac{SA^2}{8} - \frac{GA}{2} \quad , \tag{79}$$

de sorte que la condition $S = 0$ assure en même temps la dépendance linéaire de l'énergie de liaison avec le nombre de particules.

On voit que la lacune en énergie est dominée par la composante Majorana de la force. Une forte composante Majorana attractive donne une grande lacune en énergie. Notons qu'avec une force attractive de Wigner pure, les orbites occupées se trouveraient au-dessus des orbites vides. Lorsque quatre nucléons remplissent chaque orbite φ_{λ_x} les éléments de matrice du hamiltonienne de Hartree-Fock s'écrivent :

$$\langle \alpha | h | \beta \rangle = \langle \alpha | t | \beta \rangle + S \sum_{\lambda=1}^{n} \langle \alpha\lambda | v | \beta\lambda \rangle_D - G \sum_{\lambda=1}^{n} \langle \alpha\lambda | v | \lambda\beta \rangle_D \quad , \tag{80}$$

$n = A/4$ est le nombre d'orbites φ_{λ_x} .

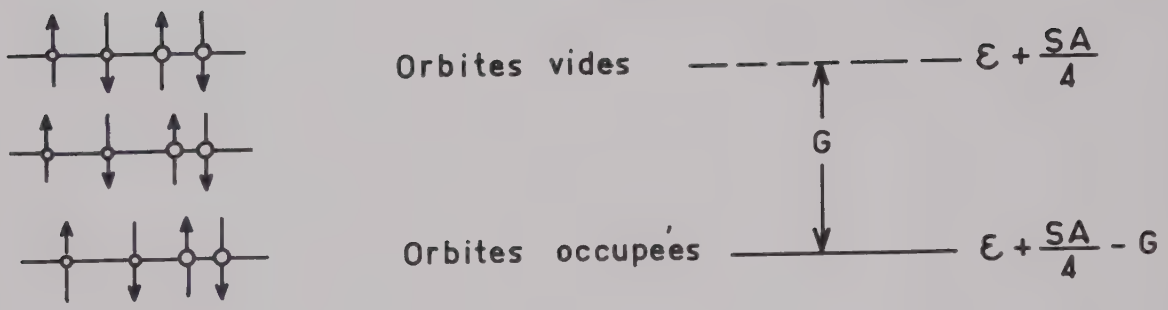


Figure 3 Le remplissage et le spectre des orbites dans le cas d'une couche majeure dégénérée avec l'interaction modèle (74) qui n'a pas de dépendance radiale.

$\langle \alpha\lambda | v | \beta\lambda \rangle_D$ est l'élément de matrice non antisymétrisé :

$$\langle \alpha\lambda | v | \beta\lambda \rangle_D = \int d\vec{r}_1 \, d\vec{r}_2 \; \varphi_\alpha^*(\vec{r}_1) \; \varphi_\lambda^*(\vec{r}_2) \; v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \; \varphi_\beta(\vec{r}_1) \; \varphi_\lambda(\vec{r}_2)$$

$$\langle \alpha\lambda | v | \lambda\beta \rangle_D = \int d\vec{r}_1 \, d\vec{r}_2 \; \varphi_\alpha^*(\vec{r}_1) \; \varphi_\lambda^*(\vec{r}_2) \; v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \; \varphi_\lambda(\vec{r}_1) \; \varphi_\beta(\vec{r}_2) \quad . \quad (81)$$

L'équation (80) est valable pour une interaction centrale avec une dépendance radiale quelconque. On peut représenter le hamiltonien Hartree-Fock (80) dans l'espace des configurations :

$$\langle \vec{r}_1 | h | \vec{r}_2 \rangle = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \frac{\vec{\nabla}^2}{2m} + S \, \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \int d\vec{r} \sum_\lambda |\varphi_\lambda(\vec{r})|^2 \, v(\vec{r}_1, \vec{r})$$

$$- G \sum_\lambda \varphi_\lambda^*(\vec{r}_2) \; v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \; \varphi_\lambda(\vec{r}_1) \quad . \quad (82)$$

On voit que S mesure l'intensité de la partie locale du champ moyen tandis que G mesure l'intensité de la non-localité du champ moyen. La dépression des orbites occupées par rapport aux orbites vides est un effet de la non-localité du champ moyen.

La grande lacune en énergie qui sépare les orbites vides et occupées est ce qui distingue avant tout les orbites du champ moyen de Hartree-Fock des orbites de Nilsson[4]. Il n'y a pas de terme non-local dans le hamiltonien de Nilsson.

L'interaction modèle (74) permet de montrer que, si une force de Rosenfeld ($S = 0$, $G > 0$) et une force de Serber ($S = -G$) donnent la même énergie de liaison, la force de Rosenfeld donne une plus grande lacune en énergie.

Soient G_r et G_s les valeurs de G de forces de Rosenfeld et de Serber. Ecrivons qu'elles donnent la même énergie de liaison

$$E_{HF} = A\varepsilon - \frac{G_r A}{2} = A\varepsilon - \frac{G_s A}{2}\left[\frac{A}{4} + 1\right]$$

ainsi

$$G_s = \frac{G_r}{\frac{A}{4} + 1} \quad . \tag{83}$$

Nous pouvons vérifier ce résultat avec une force plus réaliste. La figure 4 montre les spectres des orbites du ^{28}Si calculées avec la force de Rosenfeld (63) et la force de Serber (65). Les énergies Hartree-Fock sont respectivement - 123 MeV et - 115 MeV . Les lacunes en énergie sont respectivement 6,67 MeV et 2,5 MeV .

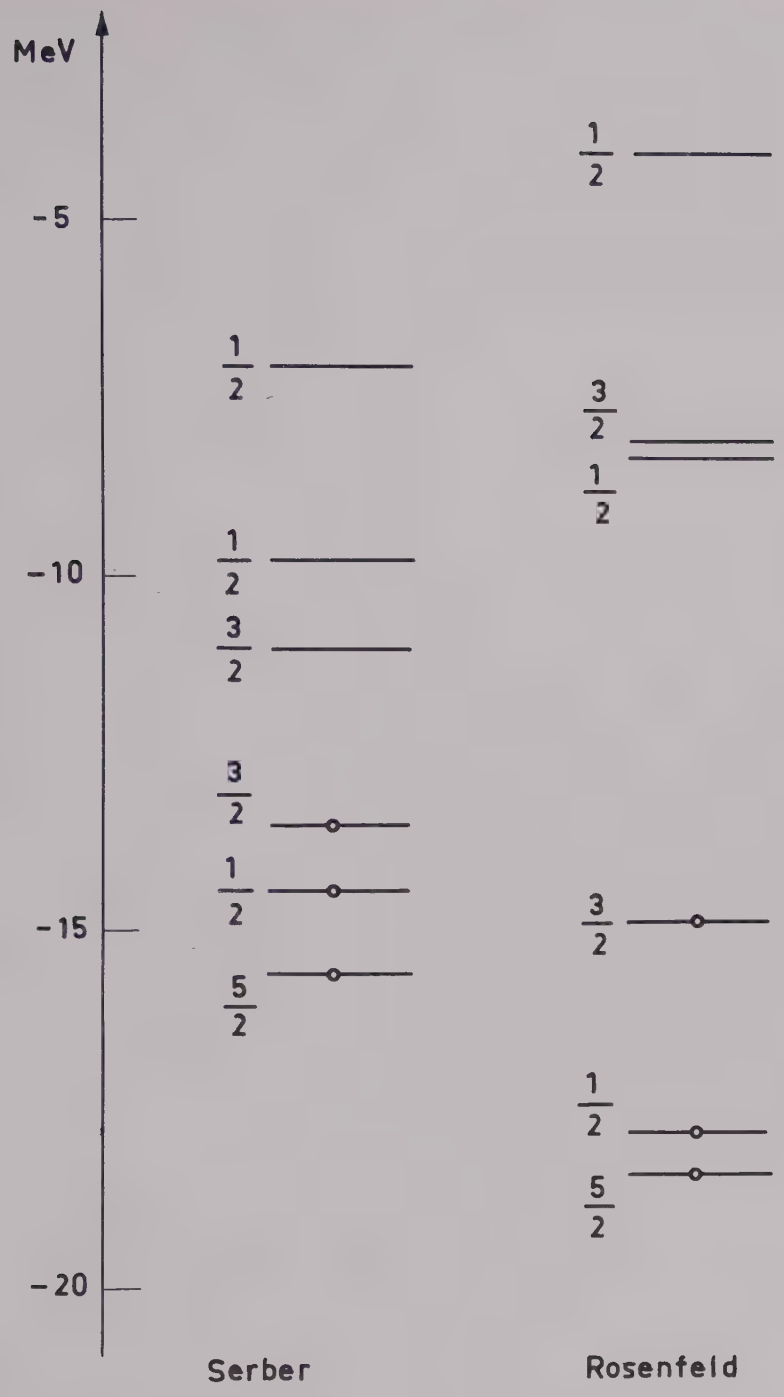


Figure 4 Le spectre des orbites de la solution aplatie du ^{28}Si obtenu avec les forces de Rosenfeld (63) et Serber (65)

CHAPITRE VII

LA DÉFORMATION DU CHAMP MOYEN : LA FORCE QUADRUPOLE-QUADRUPOLE

Le modèle du chapitre précédent ne tenait compte que de la partie monopolaire du champ moyen.

Les fonctions d'onde des orbites dans le champ moyen restaient entièrement indéterminées. Dans un noyau pair-pair $N = Z$ la force monopolaire ne pouvait que séparer les orbites occupées des orbites vides par une lacune en énergie. Les orbites occupées et videsrestaient respectivement dégénérées entre elles. Lorsqu'on utilise une force plus réaliste, telle que la force de Rosenfeld (63), la dégénérescence des orbites est levée par la déformation du champ moyen. Cette levée supplémentaire de la dégénérescence des orbites est très semblable à celle qui sépare des orbites de Nilsson[4] à mesure qu'on déforme le champ moyen. On peut comprendre cet effet en considérant une force quadrupole-quadrupole Q.Q avec un mélange arbitraire de spin et d'isospin. La force quadrupole-quadrupole est définie ainsi :

$$Q.Q = \sum_{m=-2}^{+2} r_1^2 \, r_2^2 \, Y_{2m}(\Omega_1) \, Y^*_{2m}(\Omega_2) \equiv \sum_m Q_m \, Q^*_m \quad . \tag{84}$$

Nous allons étudier le champ moyen obtenu en ajoutant la force quadrupole-quadrupole à la force monopolaire (74) :

$$v = (W + BP_\sigma - HP_\tau + MP_x)\ (1 + f\ Q.Q) \quad , \tag{85}$$

f mesure l'intensité de la composante quadrupole-quadrupole de la force par rapport à la composante monopolaire.

Avec une force centrale (85) les orbites se factorisent comme dans l'équation (75) de sorte que le hamiltonien de Hartree-Fock est diagonal dans l'espace de spin et d'isospin. On obtient l'expression suivante pour un élément de matrice du hamiltonien de Hartree-Fock :

$$\langle \alpha_x,\sigma\tau |\ h\ | \beta_x,\sigma\tau\rangle = \delta_{\alpha\beta}\ h_o\ (\alpha,\sigma\tau) + f \sum_m \langle \alpha_x | Q_m | \beta_x\rangle\ N_m^{\sigma\tau}$$

$$- f \sum_m \sum_\lambda \langle \alpha_x | Q_m | \lambda_x\rangle \langle \beta_x | Q_m | \lambda_x\rangle\ G_\lambda^{\sigma\tau} \quad . \tag{86}$$

Le premier terme h_o est la contribution de la force monopolaire (74) :

$$\langle \alpha_x,\sigma\tau |\ h_o | \beta_x,\sigma\tau\rangle = \varepsilon\ \delta_{\alpha\beta} + \delta_{\alpha\beta} \sum_\lambda S_\lambda^{\sigma\tau} - \delta_{\alpha\beta} \sum_\lambda (\alpha_x|\lambda_x)^2\ G_\lambda^{\sigma\tau} \tag{87}$$

où

$$S_\lambda^{\sigma\tau} = \sum_{\sigma_\lambda,\tau_\lambda} (W + B\delta_{\sigma,\sigma_\lambda} - H\delta_{\tau,\tau_\lambda} - M\delta_{\sigma,\sigma_\lambda}\ \delta_{\tau,\tau_\lambda})$$

$$G_\lambda^{\sigma\tau} = \sum_{\sigma_\lambda,\tau_\lambda} (W\delta_{\sigma,\sigma_\lambda}\ \delta_{\tau,\tau_\lambda} + B\delta_{\tau,\tau_\lambda} - H\delta_{\sigma,\sigma_\lambda} - M) \tag{88}$$

et

$$N_m^{\sigma\tau} = \sum_\lambda S_\lambda^{\sigma\tau} \langle \lambda_x | Q_m | \lambda_x\rangle \quad . \tag{89}$$

Lorsque quatre nucléons occupent chaque orbite λ_x comme dans la figure 3 $S_\lambda^{\sigma\tau}$ et $G_\lambda^{\sigma\tau}$ deviennent indépendants de σ et de τ et se réduisent à S et G définis par l'équation (78). Dans ce cas $N_m^{\sigma\tau}$ devient aussi indépendant de σ,τ et s'écrit :

$$N_m = S \sum_{\lambda_x} \langle \lambda_x | Q_m | \lambda_x \rangle \quad . \tag{90}$$

Les sommes sur λ_x sont limitées aux orbites occupées. Considérons les orbites (n_x, n_y, n_z) d'un oscillateur harmonique[2]

$$\varphi_{\lambda_x} = (n_x, n_y, n_z) \tag{91}$$

n_x, n_y et n_z sont les nombres de quanta dans les directions x, y et z . Supposons que les orbites λ ne contiennent que des composantes appartenant à une couche majeure, c'est-à-dire

$$n_x + n_y + n_z = \text{constante} \quad . \tag{92}$$

Il est facile de vérifier que le terme local S du hamiltonien de Hartree-Fock (86) est de la forme $ax^2 + by^2 + cz^2$ qui est diagonalisée par les états (91) de l'oscillateur harmonique. Le terme d'échange G , qui est le seul à contribuer lorsqu'on utilise une force "saturante" ($S = 0$) telle que la force de Rosenfeld, n'est pas diagonal dans la représentation (91), sauf dans des cas particuliers.

Considérons le ^{20}Ne qui a une orbite occupée par quatre nucléons. On vérifie aisément que si l'orbite occupée est un des états (91) le terme d'échange du hamiltonien de Hartree-Fock est aussi diagonalisé par ces états.

Ainsi les orbites de Hartree-Fock du ^{20}Ne sont celles d'un oscillateur déformé.

Considérons le ^{24}Mg qui a deux orbites λ_x occupées par quatre nucléons dans la couche 2s-1d. En prenant comme orbites d'essai les états (002) et (011), on trouve que l'orbite (011) est état propre du hamiltonien de Hartree-Fock, mais que celui-ci a un élément non-diagonal qui relie l'orbite occupée (002) à l'état (020), car on a

$$(002|yz|011)\ (020|yz|011) \neq 0.$$

Le mélange des états (002) et (020) est cependant petit, car les éléments diagonaux correspondants du hamiltonien de Hartree-Fock sont séparés par l'énergie:

$$-\ f\ G\ (002|Q_o|002)^2\ .$$

Ainsi les états (002) et (011) forment une bonne approximation aux orbites de Hartree-Fock.

On voit que la déformation du champ produite par une force quadrupole-quadrupole est très semblable à celle d'un oscillateur harmonique déformé. L'hamiltonien de Hartree-Fock (86) a un terme monopolaire et un terme quadrupolaire, tous les deux non-locaux. Le terme monopolaire agit sur l'énergie des orbites, mais pas sur leur fonction d'onde. La force Q.Q. contribue un terme local qui a la forme d'un oscillateur déformé et un terme non-local qui est presque diagonalisé par les fonctions d'onde d'un oscillateur déformé. Notons que ces conclusions restent valables si le terme ε dans l'expression (87) de h_o est remplacé par l'énergie cinétique. Les fonctions d'onde (mais par les énergies) des orbites de Hartree-Fock sont donc semblables aux orbites de Nilsson[4] . Le tableau 8 donne la correspondance entre les états (91) et les états $\varphi_{\ell m}$ et φ_{jm} du modèle des couches[30] .

Nous pouvons vérifier qu'en absence d'interaction spin-orbite, les orbites obtenues avec une force de Rosenfeld ayant une dépendance radiale sont semblables aux états (n_x, n_y, n_z) d'un oscillateur harmonique.

On annule l'interaction spin-orbite en remplaçant dans le hamiltonien (51) les énergies ε_j des états $d_{5/2}$ et $d_{3/2}$ par une énergie commune

$$\varepsilon = \frac{1}{5} (2\varepsilon_{3/2} + 3\varepsilon_{5/2}) \quad . \tag{93}$$

On ne change pas l'énergie de l'état $2s_{1/2}$. Cela revient à considérer qu'un terme $a\ \vec{l}.\vec{s}$ sépare les énergies expérimentales des états $d_{5/2}$ et $d_{3/2}$ et qu'on a pris $a = 0$.

Dans ce cas, on obtient la fonction d'onde suivante pour l'orbite occupée du ^{20}Ne :

$$\begin{aligned} \varphi_\lambda &= -0{,}6286\ d^{5/2}_{1/2} + 0{,}5843\ s^{1/2}_{1/2} + 0{,}5133\ d^{3/2}_{1/2} \\ &= -0{,}8115\ d_o\uparrow + 0{,}5843\ s_o\uparrow \\ &= -0{,}999\ (002)\uparrow - 0{,}006\ (020)\uparrow + 0{,}006\ (200)\uparrow \quad . \end{aligned} \tag{94}$$

La notation $d_o \uparrow$ désigne l'état $\varphi_{n\ell m\sigma}$ avec $\ell = 2$, $m = 0$ et $\sigma_z = +1/2$.

L'orbite occupée du ^{20}Ne est pratiquement un état pur $(n_x, n_y, n_z) = (002)$. La Figure 5 donne le spectre des orbites du ^{20}Ne en absence d'interaction spin-orbite.

Pour obtenir le ^{24}Mg il faut placer quatre nucléons dans les orbites d_1 ou d_{-1} qui sont dégénérées dans le champ du ^{20}Ne . Si l'orbite $d_1 \uparrow$ est occupée par un neutron et un proton, l'invariance du champ par renversement du temps exige que la seconde paire neutron-proton occupe l'orbite $d_1 \downarrow$. On obtient ainsi la solution de symétrie axiale du ^{24}Mg dont le spectre est donné par la Figure 5 . Les fonctions d'onde des orbites de cette solution sont :

$$\varphi_{\lambda_1} = -0{,}5964\, d^{5/2}_{1/2} + 0{,}6320\, s^{1/2}_{1/2} + 0{,}4870\, d^{3/2}_{1/2}$$

$$= -0{,}7700\, d_o \uparrow + 0{,}6320\, s_o \uparrow$$

$$\varphi_{\lambda_2} = -0{,}8944\, d^{5/2}_{3/2} + 0{,}4472\, d^{3/2}_{3/2} = d_1 \uparrow \quad . \qquad (95)$$

La solution à symétrie axiale du ^{24}Mg ne partage pas toutes les symétries de la solution du ^{20}Ne . Elle est symétrique par rapport à la rotation $e^{-i\pi J_y}$ mais elle n'est pas symétrique par rapport aux rotations $e^{-i\pi L_y}$ et $e^{-i\pi S_y}$ séparément . La fonction d'onde Hartree-Fock $|\Phi\rangle$ du ^{20}Ne est une fonction d'onde du couplage L-S mais celle du ^{24}Mg ne l'est pas .

La solution ellipsoïdale du ^{24}Mg est obtenue en plaçant quatre nucléons dans l'orbite $(d_1 + d_{-1})/\sqrt{2} = (011)$. Pour cette solution on obtient les orbites suivantes :

$$\varphi_{\lambda_1} = 0{,}7382\, d_o \uparrow - 0{,}6526\, s_o \uparrow - 0{,}1210\, (d_2 + d_{-2}) \uparrow$$

$$= 0{,}9795\, (002) \uparrow + 0{,}1964\, (020) \uparrow - 0{,}0456\, (200) \uparrow$$

$$\varphi_{\lambda_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_1 + d_{-1}) \uparrow = (011) \uparrow \quad . \qquad (96)$$

Les deux orbites de la solution ellipsoïdale sont très semblables aux états (002) et (011) . La Figure 5 donne le spectre des orbites des deux solutions (95) et (96) du ^{24}Mg. Les deux solutions sont invariantes par rapport au renversement du temps. Elles diffèrent par la façon dont les états d_1 et d_{-1}, dégénérés dans le champ du ^{20}Ne , composent la seconde orbite. Dans la solution à symétrie axiale, il y a deux nucléons dans chacune des orbites d_1 et d_{-1} . Dans la solution ellipsoïdale il y a quatre nucléons dans l'orbite $d_1 + d_{-1}$. La solution ellipsoïdale, qui a une énergie plus basse et une plus grande lacune en énergie, a une symétrie spatiale maxima . On peut dire que la force de Rosenfeld préfère les fonctions d'onde de Hartree-Fock qui ont un maximum de symétrie spatiale à celles qui ont la symétrie axiale. La solution ellipsoïdale du ^{24}Mg est une fonction d'onde L-S avec $S = 0$, comme celle du ^{20}Ne .

Dans la solution de forme allongée du ^{28}Si l'orbite $d_1 - d_{-1}$ est également occupée par quatre nucléons. Le maximum de symétrie spatiale est compatible, dans ce cas, avec la symétrie axiale car l'opérateur J_z laisse invariant le sous-espace des orbites occupées. Dans le ^{28}Si les nucléons remplissent exactement la moitié des orbites de la couche 2s-1d . La solution de forme aplatie du ^{28}Si s'obtient en échangeant les orbites vides et occupées de la solution allongée ainsi que le montre la Figure 6 . Ces deux solutions du ^{28}Si sont orthogonales et presque dégénérées. Le spectre des orbites est complètement renversé en passant d'une solution à l'autre ce qui est l'effet des composantes monopolaire et quadrupolaire de l'interaction nucléon-nucléon. La déformation du champ moyen change de signe.

Le fait que les orbites de Hartree-Fock ressemblent aux états d'un oscillateur harmonique montre que les états de Hartree-Fock $|\Phi\rangle$ sont semblables aux états qui diagonalisent l'interaction quadrupole-quadrupole et qui se construisent à l'aide de la théorie des groupes[13]. J.P. Elliott a montré que pour un système de plusieurs nucléons dans une couche majeure, l'interaction quadrupole-quadrupole était diagonalisée par les états obtenus en projetant un déterminant de Slater sur le sous-espace d'un moment cinétique donné.

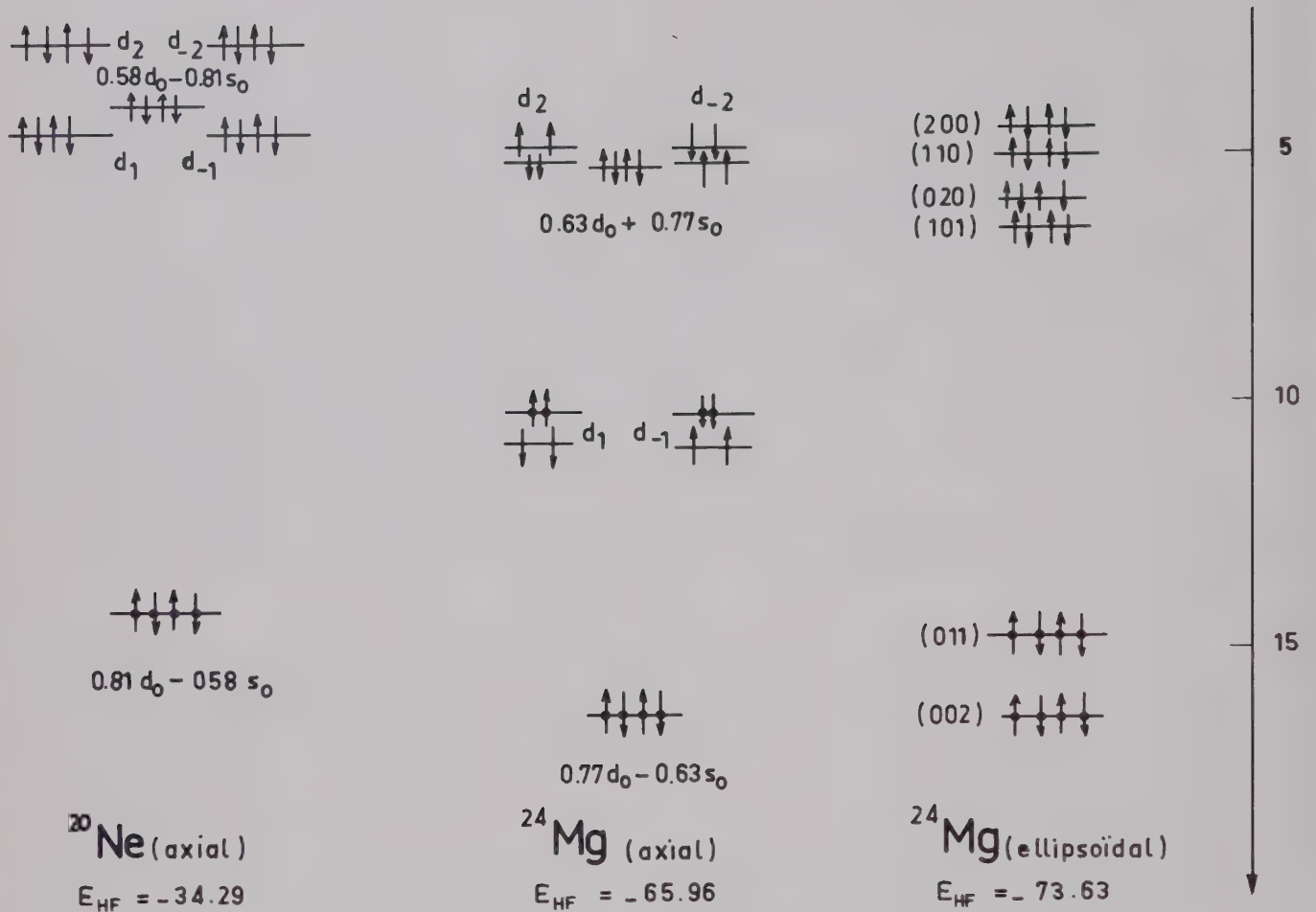


FIGURE 5

Le spectre des orbites du ^{20}Ne et du ^{24}Mg dans le cas d'une intéraction spin-orbite nulle. Les orbites sont dénotées par leur fonction d'onde dans l'espace des configurations et par l'orientation ↑ et ↓ de leur spin le long de l'axe z. Les neutrons et les protons sont dans les mêmes orbites. Le symbole d_1 dénote l'état $l = 2$ $m = 1$ de la couche 2s-1d. Les orbites de la solution ellipsoïdale sont identifiées par les états $(n_x\ n_y\ n_z)$ auxquels ils s'approchent le plus. L'énergie de Hartree-Fock de chaque solution est indiquée.

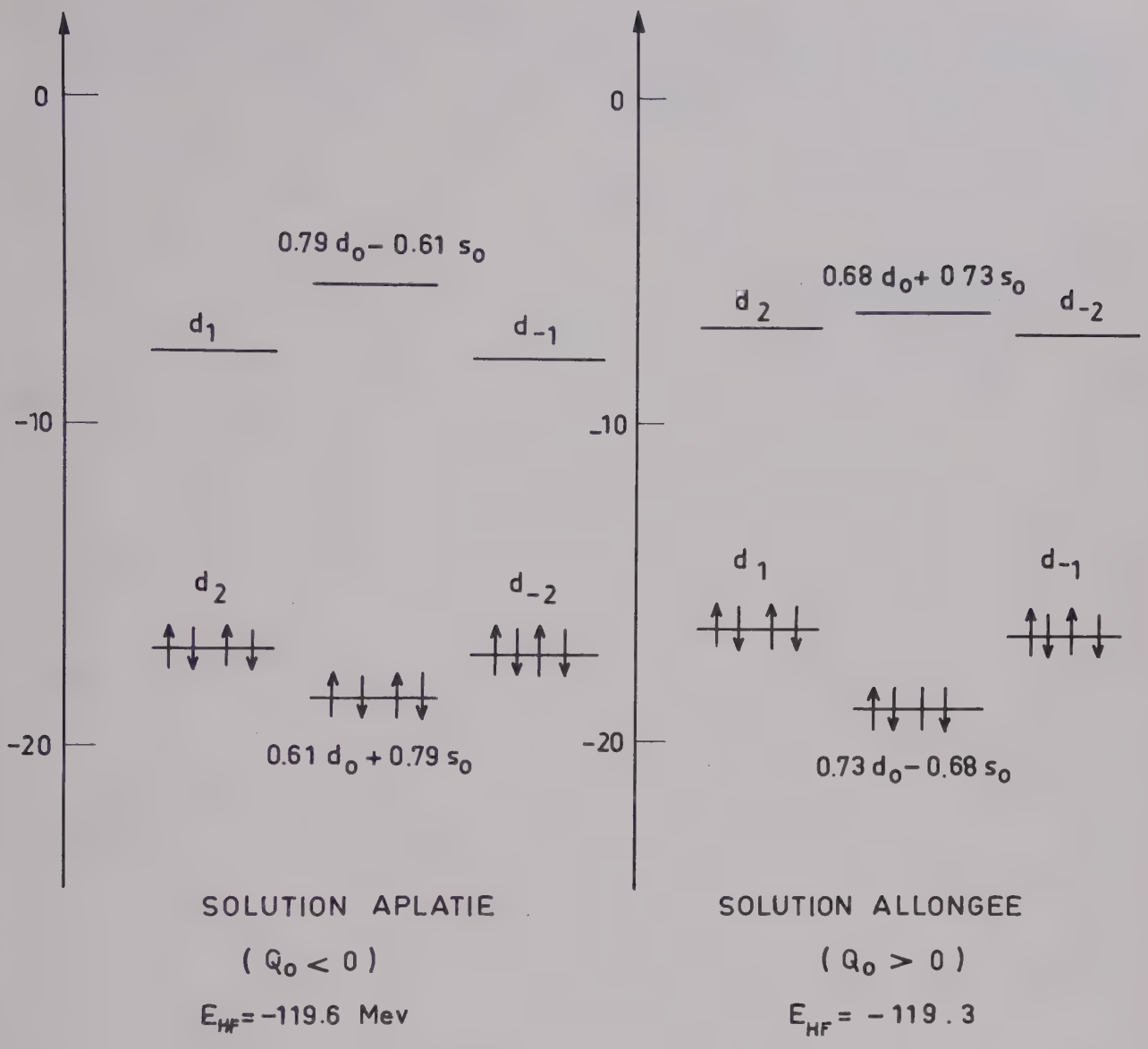


FIGURE 6

Le spectre des orbites de Hartree-Fock des solutions de forme aplatie et allongée du ^{28}Si dans le cas d'une intéraction spin-orbite nulle. Les flèches indiquent les spins des nucléons qui occupent les orbites. L'énergie de Hartree-Fock des deux solutions est donnée.

Le déterminant de Slater se compose d'états (n_x, n_y, n_z) d'un oscillateur harmonique et il est caractérisé par deux nombres λ et μ définis en fonction du nombre total de quanta dans les directions x, y et z :

$$\lambda = N_z - N_y \qquad \mu = N_y - N_x \tag{97}$$

$$N_x = \sum_{\lambda=1}^{A} (n_x^{(\lambda)} + 1/2) \ , \qquad N_y = \sum_{\lambda=1}^{A} (n_y^{(\lambda)} + 1/2) \ ,$$

$$N_z = \sum_{\lambda} (n_z^{(\lambda)} + 1/2) \ . \tag{98}$$

Les états ayant "le poids"

$$G = \lambda^2 + \lambda\mu + \mu^2 + 3(\lambda+\mu) \tag{99}$$

maximum sont ceux qui minimisent l'énergie potentielle.

On obtient des états de moment cinétique donné L en projetant le déterminant de Slater $|\Phi(\lambda\mu)\rangle$:

$$|(\lambda\mu)\ KLM\rangle = \int d\Omega\ D^{*L}_{MK}(\Omega)\ R(\Omega)\ |\Phi(\lambda\mu)\rangle \ , \tag{100}$$

où K peut prendre les valeurs $K = \mu, \mu-2, \ldots, 0$. On montre[13] aussi que chaque état $|\Phi(\lambda,\mu)\rangle$ donne des bandes de rotation qui se composent d'états de moment cinétique $L = K, K+1, \ldots, \lambda$. Dans le chapitre XII nous obtiendrons des bandes de rotation en projetant les états Hartree-Fock $|\Phi\rangle$ sur un sous-espace de moment cinétique donné comme dans l'équation (100). Ainsi dans la mesure où les orbites Hartree-Fock ressemblent aux états (n_x, n_y, n_z), la théorie Hartree-Fock donne les mêmes résultats que la théorie de J.P. Elliott et M. Moshinsky. Cela est très certainement le cas quand on annule l'interaction spin-orbite.

Mais même en présence de l'interaction spin-orbite la théorie de Hartree-Fock prévoit les mêmes symétries pour les états intrinsèques les plus bas que la théorie de J.P. Elliott et M. Moshinsky. Cependant, la façon dont on tient compte de l'interaction spin-orbite diffère dans les deux théories. Les états $(\lambda\mu)$ ne diagonalisent pas l'interaction spin-orbite et ils peuvent servir d'états de base pour la diagonaliser. Dans la méthode de Hartree-Fock l'interaction spin-orbite change la fonction d'onde des orbites mais l'état de Hartree-Fock reste un déterminant de Slater. Nous verrons que dans le ^{32}S, l'interaction spin-orbite est assez forte pour rendre diverses solutions de Hartree-Fock quasiment dégénérées. Dans ce cas, ni les états de Hartree-Fock ni les états $(\lambda\mu)$ ne sont une bonne description du noyau.

Les déterminants de Slater $|\Phi(\lambda\mu)\rangle$ sont d'excellentes solutions approchées à partir desquelles on peut commencer le processus itératif pour résoudre les équations de Hartree-Fock.

CHAPITRE VIII

LES EFFETS DE L'INTERACTION SPIN-ORBITE

L'interaction spin-orbite qui sépare les énergies des états $d_{5/2}$ et $d_{3/2}$ produit des effets importants sur les fonctions d'onde de Hartree-Fock. Elle agit sous la forme d'un terme $a\,\vec{\ell}.\vec{s}$ qui mélange les états de spins opposés de sorte que les orbites ne se factorisent plus en un produit de fonctions de spins et d'espace comme dans l'équation (75) . Si le terme spin-orbite était petit il ne perturberait que très peu les solutions des noyaux pair - pairs construites avec des couches complètes de spin et d'isospin. Dans ces états le terme $a\,\vec{\ell}.\vec{s}$ ne perturbe l'énergie qu'au second ordre en a et la grande lacune en énergie due à la force centrale réduit les amplitudes des configurations particule-trou causées par la perturbation du premier ordre sur la fonction d'onde. Mais on voit dans le tableau 7 que la lacune en énergie diminue avec le nombre de nucléons de sorte que la perturbation causée par l'interaction spin-orbite devient de plus en plus importante à mesure qu'on remplit la couche 2s-1d . En absence d'interaction spin-orbite, les fonctions d'onde des noyaux de la couche 2s-1d seraient symétriques par rapport au ^{28}Si . ^{36}A et ^{20}Ne, ^{24}Mg et ^{32}S auraient les mêmes fonctions d'onde car les équations de Hartree-Fock des orbites trou dans le ^{40}Ca sont les mêmes que celles des orbites particule à l'extérieur de ^{16}O . Mais l'interaction spin-orbite introduit une asymétrie entre les propriétés des noyaux appartenant à la première et à la deuxième moitié de la couche 2s-1d . Par exemple, pour le ^{32}S , la solution sphérique (Tableau 3) a presque la même énergie que les solutions

déformées (Tableaux 4 et 5) . La solution sphérique est obtenue en remplissant les couches $d_{5/2}$ et $2s_{1/2}$. Mais pour le ^{24}Mg la solution sphérique qui est obtenue en remplissant la couche $d_{3/2}$ a une énergie beaucoup plus haute que les solutions déformées à cause de l'interaction spin-orbite. Les propriétés du ^{32}S sont d'ailleurs mieux interprétées par le modèle vibrationnel tandis que celles du ^{24}Mg suggèrent nettement le modèle rotationnel, c'est-à-dire une déformation permanente.

Dès le début de la couche 2s-1d les fonctions d'onde des noyaux diffèrent de façon appréciable du couplage L-S obtenu en absence d'interaction spin-orbite. L'orbite occupée du ^{20}Ne donnée dans le Tableau 4 s'écrit ainsi dans la représentation $(n\ell m\sigma)$

$$\varphi_\lambda = (-0{,}8301\ d_o + 0{,}5273\ s_o)\uparrow - 0{,}1812\ d_1\downarrow \quad , \tag{101}$$

et les deux orbites occupées du ^{24}Mg s'écrivent :

$$\begin{aligned}\varphi_{\lambda_1} &= (-0{,}7014\ d_o + 0{,}5327\ s_o + 0{,}1213\ d_2 + 0{,}0479\ d_{-2}) \\ &- (0{,}3733\ d_1 + 0{,}2608\ d_{-1})\downarrow \\ \varphi_{\lambda_2} &= (-0{,}2475\ d_o + 0{,}3343\ s_o + 0{,}0870\ d_2 + 0{,}1866\ d_{-2})\uparrow \\ &+ (0{,}4693\ d_1 + 0{,}7511\ d_{-1})\downarrow \quad .\end{aligned} \tag{102}$$

Les orbites (101) et (103) du ^{20}Ne et du ^{24}Mg doivent être comparées aux orbites (94) et (96) obtenues en absence d'interaction spin-orbite. Le mélange d'états avec un spin opposé affecte les moments magnétiques des noyaux impairs (Chapitre XI).

L'interaction spin-orbite affecte aussi les énergies et la stabilité des solutions de Hartree-Fock. La Figure 7 montre comment varient l'énergie et la lacune

en énergie des solutions allongée, aplatie et sphérique du ^{28}Si en fonction de l'intensité a de l'interaction spin-orbite. Pour $a = 0$ les solutions déformées sont les plus basses et elles sont très semblables aux états $(\lambda\mu)$ avec $(\lambda\mu) = (12,0)$ et $(0,12)$. La figure 7 montre que la quasi-dégénérescence des solutions déformées n'est pas encore levée pour la valeur expérimentale de l'interaction spin-orbite. Mais l'énergie de la solution sphérique, qui est une couche complète $d_{5/2}$, est très sensible à l'interaction spin-orbite. En effet, il suffit d'abaisser l'énergie de l'état $d_{5/2}$ d'un MeV pour que la solution sphérique du ^{28}Si soit abaissée de 12 MeV . Pour une interaction spin-orbite environ deux fois plus grande que sa valeur expérimentale, la solution aplatie se confond avec la solution sphérique et la théorie de Hartree-Fock prédit alors une forme d'équilibre sphérique pour le ^{28}Si . On voit aussi dans la Figure 7 que les lacunes en énergie des solutions déformées décroissent lorsque l'interaction spin-orbite croît. La déformation permanente perd sa stabilité par rapport aux excitations particule-trou.

La Figure 8 illustre le cas du ^{32}S . La solution ellipsoïdale a l'énergie la plus basse en absence d'interaction spin-orbite, comme dans le ^{24}Mg . Elle est alors semblable à l'état $(\lambda\mu) = (4,8)$ de poids maximum. Mais à mesure que l'interaction spin-orbite croît, les solutions déformées se confondent avec la solution sphérique, qui est obtenue en remplissant les couches $d_{5/2}$ et $2s_{1/2}$. Pour la valeur expérimentale de l'interaction spin-orbite les solutions sont presque dégénérées et elles ne sont pas orthogonales. Ainsi dans le ^{32}S l'interaction spin-orbite semble détruire la stabilité de la déformation de l'état de Hartree-Fock par rapport aux vibrations β et γ par exemple. Nous verrons d'ailleurs dans le chapitre XI que le moment magnétique obtenu pour le ^{33}S ne s'explique pas dans la limite du couplage fort qui devrait être valable pour un noyau qui a une déformation permanente.

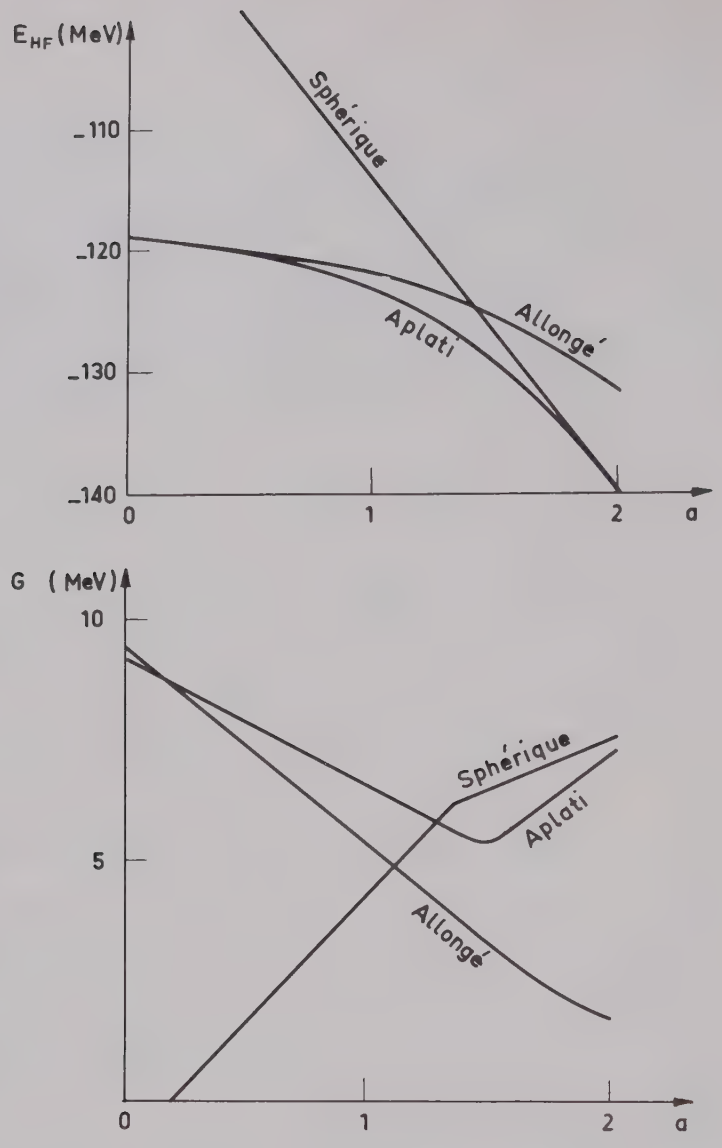


FIGURE 7

Variation de l'énergie de Hartree-Fock et de la lacune en énergie des solutions aplatie, allongée et sphérique du ^{28}Si avec l'intensité a de l'intéraction spin-orbite. Les solutions aplatie et allongée se composent d'orbites remplies $m_\lambda = 1/2, 3/2, 5/2$ et $m_\lambda = 1/2, 3/2, 1/2'$ respectivement comme indiqué dans la Table 4. L'échelle de l'intéraction spin-orbite est telle que pour $a = 1$, elle prend sa valeur expérimentale. Les discontinuités dans la lacune en énergie sont dues aux changements de la nature de l'orbite vide la plus basse. Par exemple, pour $a>1.5$ l'orbite la plus basse de la solution sphérique devient l'état $2s_{1/2}$.

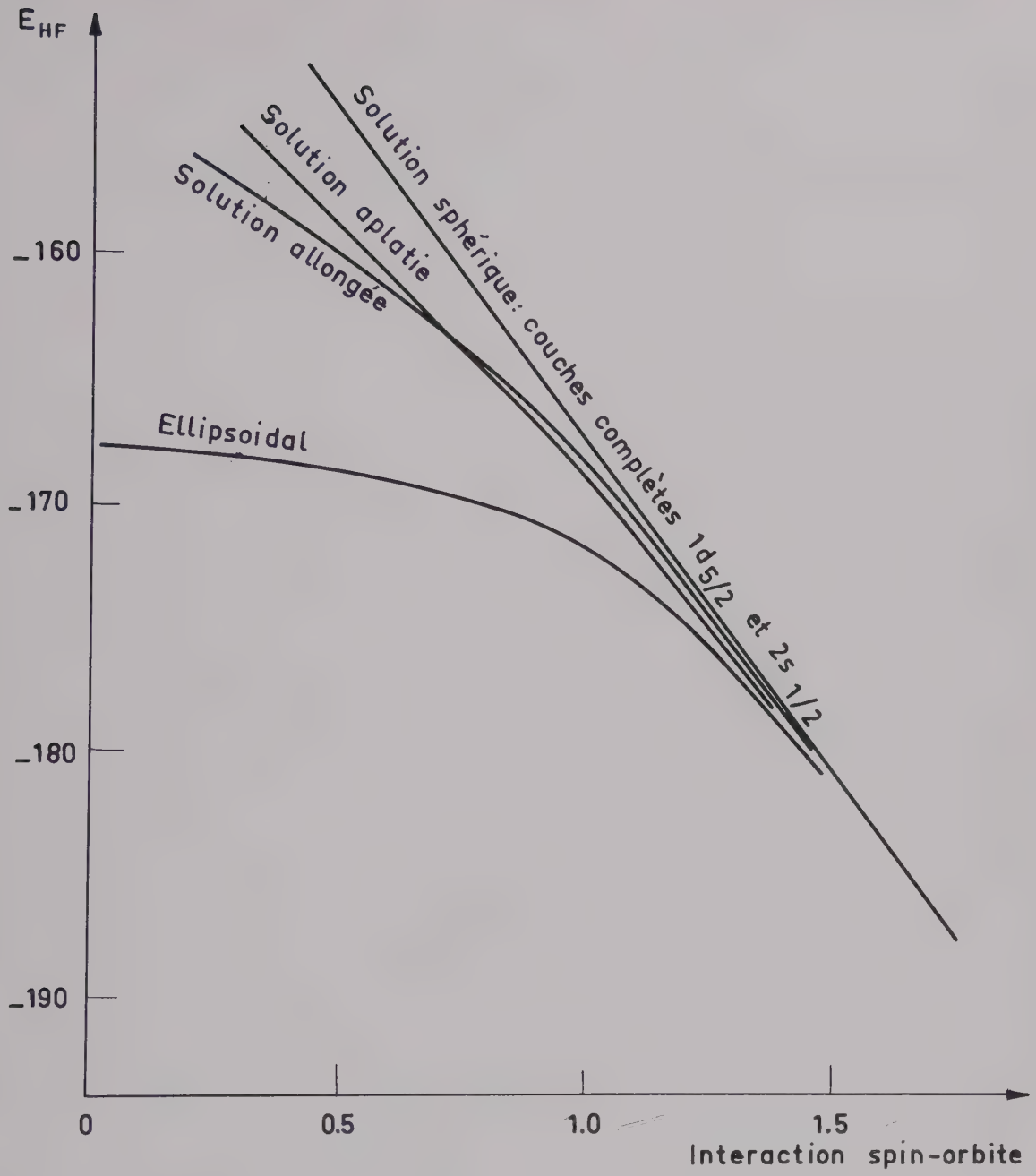


FIGURE 8

Variation de l'énergie de diverses solutions du ^{32}S avec l'intensité de l'intéraction spin-orbite exprimée dans les memes unités que dans la Figure 7.

CHAPITRE IX

LA MULTIPLICITÉ DES SOLUTIONS DES ÉQUATIONS DE HARTREE-FOCK

Pour chaque noyau il y a plusieurs solutions des équations de Hartree-Fock. On peut souvent les distinguer par la façon dont on remplit les orbites et par leurs symétries. Un exemple frappant est l'existence de deux états déformés presque dégénérés et orthogonaux du ^{28}Si, l'un de forme allongée, l'autre de forme aplatie . Idéalement, parmi toutes les solutions on voudrait en trouver une qui ait une énergie plus basse que toutes les autres et qui ait une grande lacune en énergie. Malheureusement avec les états de Hartree-Fock on obtient plusieurs formes d'équilibre dont les énergies sont assez rapprochées. On conçoit qu'un noyau puisse avoir plusieurs formes d'équilibre. Par exemple ^{16}O dans son état fondamental est une couche complète mais la présence de bandes de rotation parmi ses états excités montre qu'il a aussi une forme d'équilibre déformée. Celle-ci n'est pas rigoureusement une forme d'équilibre car on a observé des transitions entre les états de la bande de rotation vers le fondamental. Les transitions électromagnétiques entre les états de ^{16}O ne peuvent pas s'expliquer sans introduire un mélange de configurations qui n'est pas inclus dans la théorie de Hartree-Fock L'existence de plusieurs solutions rapprochées en énergie suggère aussi un mélange de configurations non négligeable dont il n'est pas tenu compte dans la théorie de Hartree-Fock. Ce mélange de configurations n'est pas simplement celui qui serait obtenu en diagonalisant le hamiltonien nucléaire parmi les diverses solutions trouvées. En effet ces solutions diffèrent souvent par le déplacement de quatre nucléons ou plus , de sorte qu'un hamiltonien qui ne contient que des forces à deux corps ne peut mélanger ces solu-

tions que par l'intermédiaire d'autres configurations qui ont une énergie plus élevée. Le grand nombre de ces configurations complique considérablement le calcul de ce mélange sauf dans quelques cas simples[23].

Le tableau 9 illustre la multiplicité des solutions. Pour chaque noyau pair-pair $N = Z$, on a diagonalisé le hamiltonien de Hartree-Fock en prenant pour solution de départ les déterminants de Slater $|\Phi(\lambda\mu)\rangle$ obtenus en plaçant quatre nucléons dans les états (n_x, n_y, n_z) d'un oscillateur harmonique.

Le tableau 9 donne les orbites occupées et la valeur (λ,μ) de la solution de départ ainsi que l'énergie et la lacune en énergie de l'état de Hartree-Fock obtenu. On voit que si on prend au départ la solution $|\Phi(\lambda\mu)\rangle$ de poids maximum, on converge vers la solution la plus basse. Mais on voit également que les solutions ont souvent une énergie très voisine.

CHAPITRE X

LES SOLUTIONS DES ÉQUATIONS DE HARTREE-FOCK POUR LES AUTRES NOYAUX

Nous n'avons jusqu'ici considéré que les noyaux pair-pairs avec un nombre égal de neutrons et de protons. Pour ces noyaux le champ moyen était invariant par renversement du temps et par l'échange d'un neutron avec un proton. Ces symétries du champ moyen sont brisées dans les noyaux impairs. Lorsqu'on ajoute un neutron à un noyau pair-pair pour former le ^{21}Ne par exemple, il y a une orbite occupée de plus et le terme correspondant dans le hamiltonien de Hartree-Fock (51) agit sur les fonctions d'onde de toutes les orbites. On dit que le coeur formé par le ^{20}Ne est polarisé par le nucléon impair. On peut toujours trouver une solution ayant la symétrie axiale mais dans un noyau ayant un nombre impair de neutrons ou de protons cette symétrie n'est pas compatible avec l'invariance par rapport au renversement du temps. En effet l'opérateur qui renverse le temps change le signe des composantes m_λ du moment cinétique J_z de chaque orbite. Il ne laisse donc pas invariant le sous-espace sous-tendu par les orbites occupées. Le tableau 10 donne les solutions du ^{21}Ne obtenues en ajoutant un neutron dans les orbites $m_\lambda = 1/2,\ 3/2$ et $5/2$ qui sont vides dans le ^{20}Ne. Le neutron polarise le coeur formé par le ^{20}Ne de sorte que les orbites du ^{21}Ne ne sont pas les mêmes que celles du ^{20}Ne . Nous pouvons comparer la solution du ^{21}Ne à l'état "non perturbé " donné aussi dans le tableau 10. L'état non perturbé du ^{21}Ne est celui qui est formé avec les orbites du ^{20}Ne.

On voit, tant sur l'énergie de l'état de Hartree-Fock que sur les fonctions d'onde des orbites que la polarisation du coeur du ^{20}Ne est petite. Elle continue à être petite au milieu de la couche 2s-1d , dans le ^{29}Si par exemple. Si on ajoute un neutron dans l'orbite $m_\lambda = 3/2$ vide de la solution aplatie du ^{28}Si, l'énergie de l'état de Hartree-Fock obtenu pour le ^{29}Si est - 131,4 MeV et l'énergie de l'état non perturbé correspondant est - 131,3 MeV . Le recouvrement de ces deux états est 0,973 . La polarisation discutée ici n'est pas la polarisation quadrupolaire qui donne au neutron une charge effective (voir le chapitre XIII), car le développement limité (46) des orbites élimine la polarisation quadrupolaire de la couche complète de ^{16}O .

Dans le ^{21}Ne les états $K = 1/2$, $3/2$ et $5/2$ sont très rapprochés en énergie. En construisant des fonctions d'onde du ^{21}Ne de moment cinétique donné le terme de Coriolis mélangera ces états[1]. Le mélange dû au terme de Coriolis a été évalué dans le cas du ^{23}Mg et du ^{25}Mg[8]. Mais nous verrons dans le chapitre XII que le mélange ainsi calculé n'est pas très précis dans les noyaux de la couche 2s-1d . La théorie des spectres des noyaux pair-impairs de la couche 2s-1d n'est pas encore suffisamment développée.

Dans les noyaux qui ont un excès de deux neutrons les orbites des neutrons et des protons ne sont plus les mêmes , mais le champ moyen peut être invariant par renversement du temps. La Figure 9 donne le spectre des orbites du ^{22}Ne. On voit que la lacune en énergie a diminué par rapport au ^{20}Ne. Pour les noyaux qui ont un excès de neutrons égal à deux ou plus, l'état Hartree-Fock est instable par rapport aux formations de paires[24].

Pour ces noyaux il existe un état B.C.S. qui a une énergie plus basse que l'état de Hartree-Fock. Cela ne se produit pas pour les noyaux qui ont un nombre égal de neutrons et de protons.

La Figure 9 donne aussi le spectre des orbites du ^{22}Na . Le ^{22}Na est un noyau impair-impair. On a placé un proton et un neutron dans l'orbite $m_\lambda = 3/2$. Dans les noyaux impair-impairs tels que le ^{22}Na il y a un mélange de Coriolis double[48] qui n'a pas encore été suffisamment étudié.

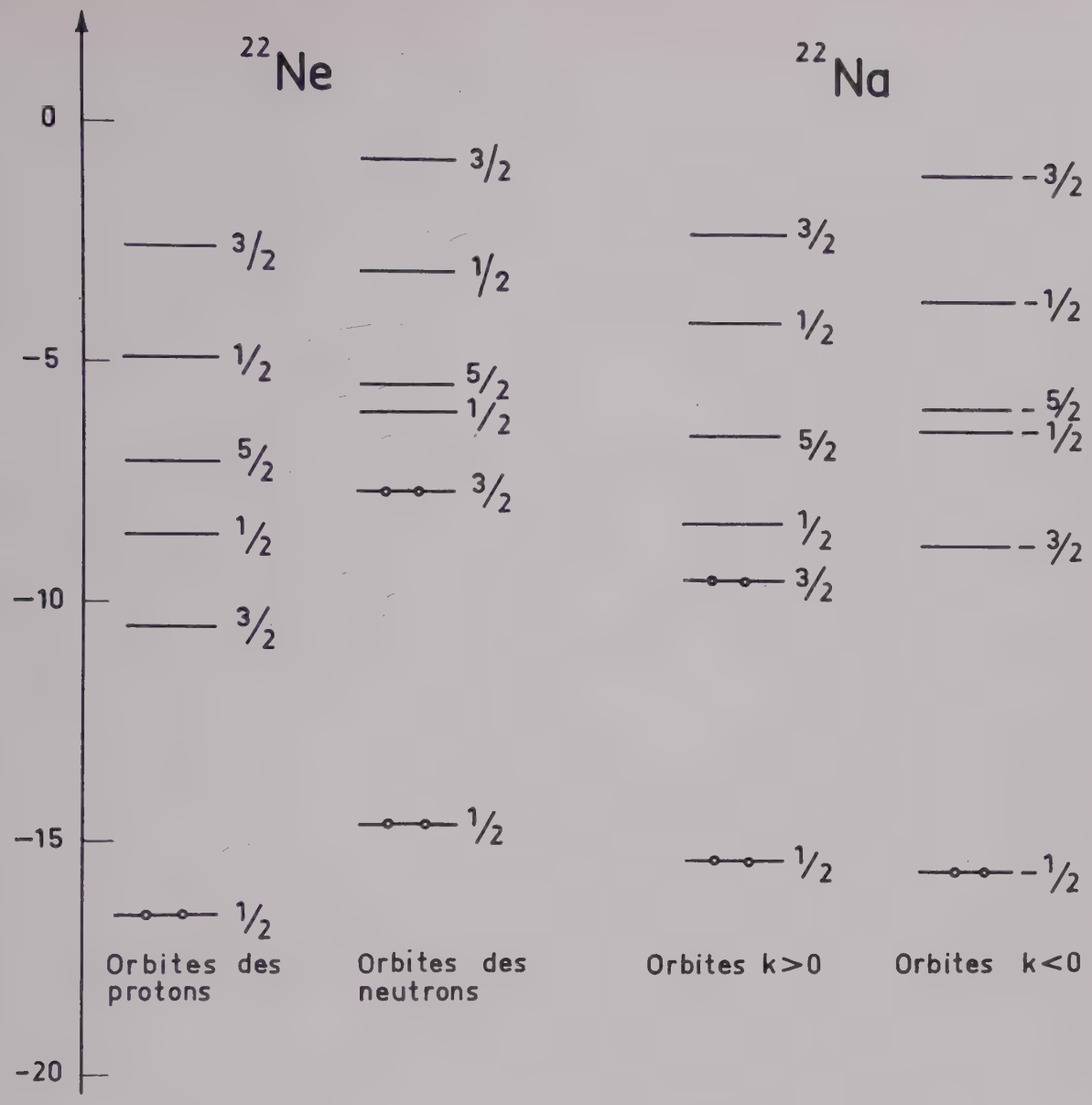


FIGURE 9

Le spectre des orbites de Hartree-Fock pour les solutions axiales du ^{22}Ne et du ^{22}Na. Le ^{22}Ne a quatre neutrons qui remplissent les orbites $K = \pm 1/2$, $K = \pm 3/2$ et deux protons dans les orbites $K = \pm 1/2$. Cette solution est invariante par rapport au renversement du temps, mais les protons et les neutrons ont des orbites différentes. Dans le ^{22}Na les orbites $K = \pm 1/2$ et $K = 3/2$ sont occupées par un neutron et un proton. Les neutrons et les protons sont dans les memes orbites, mais la solution n'est pas invariante par rapport au renversement du temps.

CHAPITRE XI

LES MOMENTS MAGNÉTIQUES DES NOYAUX PAIR-IMPAIRS

Connaissant les fonctions d'onde des orbites données par le tableau 4, nous pouvons calculer les moments magnétiques des noyaux pair-impairs dans le modèle du couplage fort[1]. Le noyau pair-impair est constitué d'un coeur pair-pair déformé et d'un nucléon dans une orbite du champ moyen déformé. Le moment cinétique $\vec{J}$ du noyau est la somme du moment cinétique $\vec{j}$ du nucléon impair et du moment cinétique $\vec{R}$ du coeur pair-pair.

$$\vec{J} = \vec{j} + \vec{R} \quad . \tag{103}$$

On sépare adiabatiquement la rotation du noyau et le mouvement du nucléon impair dans son orbite. (voir chapitre XII). Ainsi la fonction d'onde du noyau s'écrit[1] :

$$|\psi^J_{MK}\rangle = \sqrt{\frac{2J+1}{16\pi^2}} \left\{ D^{J*}_{MK}(\Omega) \; |\Phi_K\rangle + (-)^{J+K} \; D^J_{M-K}(\Omega) \; |\bar{\Phi}_{-K}\rangle \right\} , \tag{104}$$

où $D^{J*}_{MK}(\Omega)$ est une matrice de rotation et $|\Phi_K\rangle$ est la fonction d'onde intrinsèque du noyau

$$|\Phi_K\rangle = b^\dagger_{\lambda_K} \; |\Phi_o\rangle \quad ,$$

c'est-à-dire un déterminant de Slater formé par l'orbite λ_K du nucléon impair

et par les orbites occupées du coeur pair-pair $|\Phi_o\rangle$. On considère que le coeur a la symétrie axiale et l'invariance par rapport au renversement du temps ce qui explique le deuxième terme de l'expression (104) :

$$J_z |\Phi_K\rangle = K |\Phi_K\rangle \qquad J_z |\Phi_o\rangle = 0$$

$$|\Phi_{-K}\rangle = e^{-i\pi J_y} |\Phi_K\rangle \qquad |\Phi_o\rangle = e^{-i\pi J_y} |\Phi_o\rangle \quad .$$

Le moment magnétique du système est représenté par l'opérateur vectoriel

$$\vec{\mu} = g_\ell \vec{\ell} + g_s \vec{s} + G_R \vec{R} \quad , \qquad (105)$$

où $\vec{\ell}$ et $\vec{s}$ sont le moment cinétique et le spin du nucléon impair et où $\vec{R}$ est le moment cinétique du coeur pair-pair. g_ℓ et g_s sont les facteurs gyromagnétiques du moment cinétique orbital et du spin :

$g_\ell = 1$ $\qquad g_s = 5,58$ pour un proton

$g_\ell = 0$ $\qquad g_s = -3,85$ pour un neutron.

Les moments cinétiques sont exprimés en unités de $\hbar$ et les moments magnétiques sont en magnétons nucléaires $e\hbar/2m_pC$.

G_R est le facteur gyromagnétique du coeur pair-pair . Nous avons pris la valeur $G_R = 0,5$ qui correspond au cas où le coeur a un nombre égal de neutrons et de protons et où les spins des nucléons dans le coeur s'annulent. Le moment magnétique du noyau dans un état de spin J est défini par :

$$\mu = \langle \vec{\mu} \rangle_{J,M=J} = \frac{\langle \vec{\mu}.\vec{J} \rangle}{J+1} \quad , \tag{106}$$

où $\langle \vec{\mu} \rangle_{J,M=J}$ désigne la valeur moyenne dans l'état (104) avec $M = J$. En utilisant la relation $\vec{j} = \vec{\ell} + \vec{s}$ et l'équation (103) on obtient[4] :

$$\mu = \frac{1}{J+1}\left[(g_s - g_\ell) \langle \vec{s}.\vec{J} \rangle + (g_\ell - g_R) \langle \vec{j}.\vec{J} \rangle + g_R \langle \vec{J} \rangle^2 \right] . \tag{107}$$

En évaluant la valeur moyenne il faut tenir compte de ce que l'opérateur $\vec{J}$ agit sur la variable Ω du mouvement de rotation tandis que les opérateurs $\vec{s}$ et $\vec{j}$ agissent sur les variables du nucléon impair. On obtient ainsi l'expression suivante pour le moment magnétique :

$$\mu = g_R J + \frac{K}{J+1}\left\{ (g_s - g_\ell) \langle \lambda_K | s_z | \lambda_K \rangle + (g_\ell - g_R) K + \delta_{K,1/2}\, b \right\} , \tag{108}$$

où :

$$b = (J + 1/2)\,(-)^{J-1/2}\,[a + \langle \lambda_K | s_+ | \lambda_{-K} \rangle] \quad ; \tag{109}$$

l'orbite λ_{-K} est obtenue à partir de l'orbite λ_K par la rotation

$$\varphi_{\lambda_{-K}} = e^{-i\pi J_y} \varphi_{\lambda_K} \quad ,$$

et a est le coefficient de découplage des orbites $K = 1/2$:

$$a = \langle \lambda_K | j_+ | \lambda_{-K} \rangle = \sum_j (-)^{j-1/2}\,(j + 1/2)\; C_j^{\lambda\,2} \quad . \tag{110}$$

L'état fondamental d'un noyau déformé est en général le début d'une bande de rotation c'est-à-dire un état de spin $I = K$. Pour ces états on obtient les expressions suivantes[31] du moment magnétique en fonction des coefficients C_j^λ qui définissent les orbites λ_K :

Orbite λ_K de la couche 1p

$I = K = 1/2$ neutron $\mu = 0{,}804 - 0{,}167\,[C^2_{1/2} - 2C^2_{3/2}]$

proton $\mu = -0{,}431 + 0{,}167\,[C^2_{1/2} - 2C^2_{3/2}]$

$I = K = 3/2$ neutron $\mu = -0{,}848$

proton $\mu = 2{,}570$

Orbite λ_K de la couche 2s-1d

$I = K = 1/2$ neutron $\mu = -1{,}392C^2_{5/2} - 0{,}049C^2_{3/2} - 2{,}080C^2_{1/2} + 2{,}5C_{5/2}\,C_{3/2} + 0{,}167$

proton $\mu = 1{,}570C^2_{5/2} + 0{,}125C^2_{3/2} + 2{,}460C^2_{1/2} - 3C_{5/3}\,C_{3/2} + 0{,}333$

$I = K = 3/2$ neutron $\mu = -0{,}689(C^2_{5/2} - C^2_{3/2}) + 1{,}835C_{5/2}\,C_{3/2} + 0{,}3$

proton $\mu = 0{,}826(C^2_{5/2} - C^2_{3/2}) - 2{,}201C_{5/2}\,C_{3/2} + 1{,}2$

$I = K = 5/2$ neutron $\mu = -1{,}009$

proton $\mu = 3{,}781$. (111)

Les moments magnétiques calculés avec les fonctions d'onde du tableau 4 sont donnes par le tableau 11. On peut faire le commentaire suivant sur les résultats obtenus. Les noyaux de spin $J = K = 5/2$ de la couche 2s-1d (^{25}Mg, ^{27}Al)

et les noyaux de spin $J = K = 3/2$ de la couche 1p (^{11}B) ont des moments magnétiques qui dépendent uniquement du modèle de couplage fort mais qui sont indépendants des coefficients C_j^{λ} car leurs orbites impaires sont des états $d_{5/2}^{5/2}$ et $p_{3/2}^{3/2}$ purs respectivement. Un bon accord est obtenu pour ces noyaux. Les moments magnétiques des noyaux de spin $J = K = 3/2$ de la couche 2s-1d (^{21}Ne, ^{23}Na, ^{33}S, ^{35}Cl) et les noyaux de spin $J = K = 1/2$ de la couche 1p (^{13}C) dépendent du mélange des états $d^{5/2}$ et $d^{3/2}$ et des états $p^{3/2}$ et $p^{1/2}$ respectivement . Ce mélange est sensible au rapport des intensités de l'interaction spin-orbite et de la force centrale nucléon-nucléon. L'accord obtenu est bon sauf pour le ^{33}S . L'accord serait amélioré en augmentant l'interaction spin-orbite mais cela rendrait encore plus instable la déformation du ^{32}S et le modèle de couplage fort ne serait alors plus valable. Une meilleure valeur est obtenue pour le ^{33}S avec le modèle vibrationnel[32]. Dans ce modèle le ^{33}S est décrit par un nucléon dans l'orbite $d^{3/2}$ à l'extérieur d'un coeur sphérique de ^{32}S (cette configuration seule donnerait la valeur de Schmidt du moment mangétique) et par des excitations particule-trou qui sont calculées au premier ordre des perturbations. L'accord est bon pour les noyaux qui ont un spin $J = K = 1/2$ dans la couche 2s-1d (^{19}F, ^{29}Si). Pour le ^{29}Si le moment mangétique expérimental ne peut être obtenu qu'avec la solution aplatie du ^{28}Si. Le modèle vibrationnel ne donne pas un bon moment magnétique pour le ^{29}Si [32]. Cela semble confirmer la nature déformée du ^{28}Si.

Notons enfin qu'on obtient également le moment magnétique de l'état excité $5/2^+$ du ^{19}F.

LE SPECTRE D'ENERGIE D'UNE BANDE DE ROTATION DANS LE COUPLAGE FORT.

Le modèle de couplage fort prédit également le spectre d'une bande de rotation[1]. En effet le hamiltonien du système décrit par la fonction d'onde (104) est :

$$H = \frac{1}{2\theta} \vec{R}^2 + h \quad , \tag{112}$$

où h est le hamiltonien de Hartree-Fock qui décrit le champ moyen déformé. θ est le moment d'inertie du noyau. De même qu'il fallait expliciter l'action $g_R \vec{R}$ de l'opérateur moment magnétique sur la fonction d'onde $D^J_{MK}(\Omega)$ qui décrit la rotation du coeur, nous devons expliciter dans le hamiltonien (112) la partie $\frac{1}{2\theta} \vec{R}^2$ qui décrit la rotation du coeur. En remplaçant $\vec{R}$ par $\vec{J} - \vec{j}$ dans le hamiltonien (112) et en prenant sa valeur moyenne dans l'état (104) on obtient l'expression suivante pour le spectre d'une bande de rotation :

$$E_J = \frac{1}{2\theta}\left[J(J+1) + (-)^{J-1/2} (J + 1/2)\, a\, \delta_{K,1/2} \right] . \tag{113}$$

Nous allons étudier dans le chapitre suivant la validité de l'expression (113) .

CHAPITRE XII

LA PROJECTION DU MOMENT CINÉTIQUE

Les états Hartree-Fock (4) engendrent des bandes de rotation dans les noyaux déformés. On a vu que dans le modèle adiabatique[4] les états du noyau qui ont un moment cinétique J donné sont décrits par une fonction d'onde qui se factorise de façon à séparer le mouvement de rotation du mouvement des nucléons dans le champ déformé. Plus exactement, un état de moment cinétique total J et de projection M sur l'axe z du système de référence du laboratoire, engendré par un état déformé $|\Phi_K\rangle$ qui a une projection K du moment cinétique sur l'axe z du référentiel attaché au noyau s'écrit ainsi :

$$|\psi^J_{MK}\rangle = \sqrt{\frac{2J+1}{16\pi^2}} \left\{ D^{*J}_{MK}(\Omega)\ |\Phi_K\rangle + (-)^{J+K}\ D^{*J}_{M-K}(\Omega)\ |\Phi_{-K}\rangle \right\} \quad , \qquad (114)$$

où $|\Phi_{-K}\rangle = e^{-i\pi J_y} |\Phi_K\rangle$.

Ce modèle semi-classique introduit la variable collective Ω qui représente l'orientation de l'état déformé $|\Phi_K\rangle$ par rapport au système du laboratoire. Cette variable est redondante car l'état $|\Phi_K\rangle$ dépend de toutes les coordonnées du noyau. On a vu dans le chapitre précédent que dans le modèle adiabatique il faut expliciter, au besoin, la dépendance des opérateurs -tels que le moment magnétique et le hamiltonien- sur la variable Ω . Cela introduit des

paramètres tels que le facteur gyromagnétique g_R et le moment d'inertie θ qu'il faut savoir calculer à l'aide d'un modèle. Par exemple, on peut calculer le moment d'inertie par la formule d'Inglis[34] ou de Thouless-Valatin[49]. Il y a une autre méthode pour décrire l'état $|\psi^J_{MK}\rangle$ qui évite d'introduire la variable redondante Ω ; c'est la méthode de projection de Peierls et Yoccoz[26] qui fait appel à l'intégrale de Hill-Wheeler[27] :

$$|\psi^J_{MK}\rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2 N^{1/2}_{JK}} \int d\Omega \; D^{*J}_{MK}(\Omega) \; R(\Omega) \; |\Phi_K\rangle \quad , \tag{115}$$

$R(\Omega)$ est l'opérateur de rotation

$$R(\Omega) = e^{-i\alpha J_z} \; e^{-i\beta J_y} \; e^{-i\gamma J_z} \quad , \tag{116}$$

dont les éléments de matrice sont[2] :

$$D^J_{MK}(\Omega) = \langle JM|R(\Omega)|JK\rangle \quad ,$$

α, β et γ sont les angles d'Euler qui définissent l'angle de rotation Ω .

Nous verrons que le modèle adiabatique (114) est une approximation de la méthode de projection (115) et nous allons étudier les conditions de validité de cette approximation.

La fonction d'onde (115) est la projection de l'état intrinsèque $|\Phi_K\rangle$ sur le sous-espace de moment cinétique J ; en effet il est facile de montrer que

$$P^J_M \equiv \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega \; D^{J*}_{MK}(\Omega) \; R(\Omega) = \sum_{\alpha K} |\alpha JM\rangle \langle \alpha JK| \quad , \tag{117}$$

où α est un ensemble complet de nombres quantiques autres que J, M et K .

N_{JK} est la constante de normalisation

$$N_{JK} = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega \; D^{*J}_{KK}(\Omega) \langle \Phi_K | \; R(\Omega) \; | \Phi_K \rangle \quad . \tag{118}$$

On montre[4] que les éléments de matrice d'un opérateur tensoriel T^k_q entre des états (114) décrits dans le modèle adiabatique, sont donnés par l'expression suivante :

$$\langle \psi^{J_1}_{M_1 K_1} | T^k_q | \psi^{J_2}_{M_2 K_2} \rangle = \sqrt{\frac{2J_2+1}{2J_1+1}} \begin{bmatrix} J_2 & k & J_1 \\ M_2 & q & M_1 \end{bmatrix}$$

$$\times \sum_{\nu} \begin{bmatrix} J_2 & k & J_1 \\ K_2 & \nu & K_1 \end{bmatrix} \langle \Phi_{K_1} | T^k_\nu | \Phi_{K_2} \rangle$$

$$+ (-)^{J_1+K_1} \begin{bmatrix} J_2 & k & J_1 \\ K_2 & \nu & -K_1 \end{bmatrix} \langle \Phi_{-K_1} | T^k_\nu | \Phi_{K_2} \rangle \quad . \tag{119}$$

En plus des règles de sélection évidentes, dues au premier coefficient de Clebsch-Gordan qui traduit le théorème de Wigner Eckhart, l'élément de matrice (119) implique aussi la règle de sélection bien connue :

$$k \geq |K_1 - K_2| \quad .$$

L'expression (119) n'est valable que pour les opérateurs qui n'ont pas de dépendance explicite sur la variable Ω . Les éléments de matrice de l'opérateur T^k_q , entre les fonctions d'onde projetées (115) sont :

$$\langle \psi^{J_1}_{M_1 K_1} | T^k_q | \psi^{J_2}_{M_2 K_2} \rangle = \frac{(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)}{(8\pi^2)^2 \, N^{1/2}_{J_1 K_1} \, N^{1/2}_{J_2 K_2}}$$

$$\times \int d\Omega_1 \, d\Omega_2 \; D^{J_1}_{M_1 K_1}(\Omega_1) \; D^{*J_2}_{M_2 K_2}(\Omega_2) \; \langle \Phi_{K_1} | R^{-1}(\Omega_1) \; T^k_q \; R(\Omega_2) | \Phi_{K_2} \rangle \quad . \qquad (120)$$

Cette expression peut se réduire à une seule intégrale à l'aide des règles de commutation[2] entre l'opérateur tensoriel T^k_q et l'opérateur de rotation $R(\Omega_2)$:

$$T^k_q \; R(\Omega_2) = \sum_\nu D^{*k}_{q\nu}(\Omega_2) \; R(\Omega_2) \; T^k_\nu \quad . \qquad (121)$$

Les rotations forment un groupe de sorte que la rotation $R(\Omega_1)$ peut s'écrire ainsi :

$$R(\Omega_1) = R(\Omega_2) \; R^{-1}(\Omega_3) \quad . \qquad (122)$$

En prenant l'élément de matrice de l'équation (122) entre l'état $|J_1 M_1\rangle$ et l'état $|J_1 K_1\rangle$ on obtient :

$$D^{J_1}_{M_1 K_1}(\Omega_1) = \sum_\mu D^{J_1}_{M_1 \mu}(\Omega_2) \; D^{*J_1}_{K_1 \mu}(\Omega_3) \quad . \qquad (123)$$

Les équations (121), (122) et (123) donnent l'expression recherchée de l'élément de matrice :

$$\langle \psi^{J_1}_{M_1 K_1} | T^k_q | \psi^{J_2}_{M_2 K_2} \rangle = \frac{2J_2 + 1}{8\pi^2 \, N^{1/2}_{J_1 K_1} \, N^{1/2}_{J_2 K_2}} \begin{bmatrix} J_2 & k & J_1 \\ M_2 & q & M_1 \end{bmatrix}$$

$$\times \sum_{\mu\nu} \begin{bmatrix} J_2 & k & J_1 \\ K_2 & \nu & \mu \end{bmatrix} \int d\Omega \; D^{*J_1}_{K_1 \mu}(\Omega) \langle \Phi_{K_1} | R(\Omega) T^k_\nu | \Phi_{K_2} \rangle \qquad (124)$$

A cause de la symétrie axiale les états intrinsèques $|\Phi_K\rangle$ sont des états propres de J_z avec la valeur propre K . Cette propriété simplifie encore l'expression pour la constante de normalisation (118) ainsi que l'intégrale de l'expression (124) :

$$N_{JK} = \frac{2J + 1}{2} \int_0^\pi d\beta \; \sin\beta \; d^J_{KK}(\beta) \langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle \qquad (125)$$

et

$$\frac{2J_1 + 1}{8\pi^2} \int d\Omega \; D^{*J_1}_{K_1 \mu}(\Omega) \langle \Phi_{K_1} | R(\Omega) \; T^k_\nu | \Phi_{K_2} \rangle$$

$$= \frac{2J_1 + 1}{2} \int_0^\pi d\beta \; \sin\beta \; d^{J_1}_{K_1 \mu}(\beta) \langle \Phi_{K_1} | e^{-i\beta J_y} \; T^k_\nu | \Phi_{K_2} \rangle \quad , \qquad (126)$$

$d^J_{MK}(\beta)$ est la matrice de rotation réduite :

$$d^J_{MK}(\beta) = \langle \alpha JM | e^{-i\beta J_y} | \alpha JK \rangle \quad .$$

On peut utiliser l'expression (124) pour calculer l'élément de matrice de n'importe quel opérateur, en particulier le hamiltonien nucléaire (7) qui est un opérateur tensoriel d'ordre zéro. On obtient alors l'énergie E_J de l'état de moment cinétique J de la bande de rotation engendrée par l'état intrinsèque $|\Phi_K\rangle$:

$$E_J = \langle \psi^J_{MK} | H | \psi^J_{MK} \rangle = \frac{\int_o^\pi d\beta \sin\beta \; d^J_{KK}(\beta) \langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} H | \Phi_K \rangle}{\int_o^\pi d\beta \sin\beta \; d^J_{KK}(\beta) \langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle} \quad . \qquad (127)$$

Verhaar[28] a montré que si les recouvrements

$$\langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} T^k_q | \Phi_K \rangle \qquad \text{et} \qquad \langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle \qquad (128)$$

étaient nuls sauf pour les valeurs de β voisines de $\beta \sim 0$ et $\beta \sim \pi$, l'élément de matrice (119) de l'opérateur T^k_q calculé dans le modèle adiabatique se réduit à l'élément de matrice (124) de l'opérateur T^k_q calculé avec les états projetés. Considérons par exemple l'expression (127) qui donne le spectre en énergie d'une bande de rotation. Supposons que les fonctions :

$$h(\beta) = \langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} H | \Phi_K \rangle$$

et $$n(\beta) = \langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle$$

ne contribuent aux intégrales (127) que pour les valeurs voisines de $\beta \sim 0$ et $\beta \sim \pi$. Nous pouvons dans ce cas remplacer la fonction $d^J_{KK}(\beta)$ par son développement en puissances de β autour des valeurs $\beta \sim 0$ et $\beta \sim \pi$:

$$d^J_{KK}(\beta) = 1 - \frac{\beta^2}{4}\left[J(J+1) - K^2\right] + \ldots \qquad \beta \sim 0$$

$$d^J_{KK}(\pi-\beta) = (-)^J \; d^J_{KK}(\beta) \qquad \text{pour} \quad K = 0$$

$$d^J_{KK}(\pi-\beta) = \frac{1}{2}(J+1/2) \quad (-)^{J-1/2}\,\beta + \ldots. \qquad \text{pour} \quad K = 1/2\ ,\ \beta \sim \pi$$

$$d^J_{KK}(\pi-\beta) = -\frac{1}{8} \quad (-)^J \quad J(J+1)\,\beta^2 + \ldots \qquad \text{pour} \quad K = 1\ ,\ \beta \sim \pi\ . \qquad (129)$$

Considérons une bande de rotation engendrée par un état $|\Phi_K\rangle$ avec $K = 0$. On peut développer les intégrales (127) de la façon suivante :

$$\int_o^\pi \sin\beta \; d\beta \; \langle\Phi_K| e^{-i\beta J_y} H |\Phi_K\rangle \; d^J_{oo}(\beta) = \left[1 + (-)^J\right]$$

$$\times \left\{h_o - h_2 \; J(J+1)\right\}$$

$$\int_o^\pi \sin\beta \; d\beta \; \langle\Phi_K| e^{-i\beta J_y} |\Phi_K\rangle \; d^J_{oo}(\beta) = \left[1 + (-)^J\right]$$

$$\times \left\{n_o - n_2 \; J(J+1)\right\} \qquad ; \qquad (130)$$

où

$$h_{2p} = \int_{\beta \sim 0} \sin\beta \; d\beta \; \langle\Phi_K| e^{-i\beta J_y} H |\Phi_K\rangle \; \beta^{2p}$$

et

$$n_{2p} = \int_{\beta \sim 0} \sin\beta \; d\beta \; \langle\Phi_K| e^{-i\beta J_y} |\Phi_K\rangle \; \beta^{2p} \qquad (131)$$

Puisque seules les valeurs $\beta \sim 0$ contribuent aux intégrales (131), on a $h_2 << h_o$ et $n_2 << n_o$. L'énergie E_J s'écrit alors :

$$E_J = \frac{h_o - h_2 \; J(J+1)}{n_o - n_2 \; J(J+1)} \simeq E_o + \frac{1}{2\theta} \; J(J+1) \quad ,$$

avec $J = 0, 2, 4, \ldots$.

Le spectre E_J obtenu a bien la forme (113) d'une bande de rotation et le moment d'inertie θ de l'état déformé est donné par :

$$\frac{1}{2\theta} = \left[\frac{n_2}{n_o} - \frac{h_2}{h_o} \right] \quad . \tag{132}$$

Le début de la bande se trouve à l'énergie $E_o = \frac{h_o}{n_o}$.

Considérons maintenant une bande de rotation engendrée par un état $|\Phi_K\rangle$ avec $K = 1/2$. On obtient par la même méthode le spectre caractéristique (131) d'une bande $K = 1/2$:

$$E_J = E_o + \frac{1}{2\theta} \left[J(J+1) - \frac{1}{4} + (-)^{J-1/2} \; (J + 1/2) \; a \right]$$

où le facteur de découplage est donné par l'expression

$$a = \frac{1}{2} \left[\frac{h_1}{h_o} - \frac{n_1}{n_o} \right] \quad ,$$

avec : $h_1 = \int_{\beta \sim 0} \sin\beta \, d\beta \, \langle \Phi_K | e^{+i\beta J_y} H | \Phi_{-K} \rangle \, \beta$

et : $n_1 = \int_{\beta \sim 0} \sin\beta \, d\beta \, \langle \Phi_K | e^{+i\beta J_y} | \Phi_{-K} \rangle \, \beta$.

Les expressions obtenues pour les spectres, les moments d'inertie et les facteurs de découplage ne sont valables que pour les débuts d'une bande de rotation, à savoir pour les états de moment cinétique J assez bas pour pouvoir limiter le développement des fonction $d^J_{KK}(\beta)$ aux termes les plus bas.

Nous allons maintenant vérifier par un calcul exact de l'expression (127) si les hypothèses de Verhaar qui conduisent aux résultats du modèle adiabatique sont vérifiées dans les noyaux légers.

Pour calculer les recouvrements, nous écrivons l'état (4) qui a subi une rotation d'un angle β autour de l'axe y de la façon suivante :

$$e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle = b^{\dagger'}_{\lambda_1} \, b^{\dagger'}_{\lambda_2} \ldots b^{\dagger'}_{\lambda_A} | 0 \rangle \quad , \tag{133}$$

où $K = \sum_{\lambda=1}^{A} m_\lambda$.

$\varphi_{\lambda'}$ est la fonction d'onde de l'orbite λ qui a subi la rotation :

$$b^{\dagger'}_\lambda = e^{-i\beta J_y} \, b^\dagger_\lambda \, e^{i\beta J_y}$$

$$\varphi_{\lambda'} = e^{-i\beta J_y} \varphi_\lambda = \sum_j C^\lambda_j \sum_m d^j_{m m_\lambda}(\beta) \, \varphi_{jm} \quad .$$

Le théorème de Wick permet d'obtenir l'expression suivante pour le recouvrement

$$\langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle = \det \left[N_{\lambda\mu} (\beta) \right] \qquad (134)$$

où $N_{\lambda\mu}(\beta)$ est la matrice des produits scalaires des orbites λ avec les orbites λ' qui ont subi la rotation :

$$N_{\lambda\mu}(\beta) = \langle o | b_{\lambda'} \, b^{\dagger}_{\mu} | o \rangle = \langle o | b_{\lambda} \, e^{i\beta J_y} \, b^{\dagger}_{\mu} | o \rangle$$

$$= \sum_j C^{\lambda *}_j \; C^{\mu}_j \; d^{j}_{m_\lambda \, m_\mu} (\beta) \quad .$$

Les fonctions $d^{j}_{mm'}(\beta)$ sont des polynômes simples connus de $\sin\beta/2$ et $\cos\beta/2$. Ainsi, lorsque les coefficients C^{λ}_j sont déterminés en résolvant les équations de Hartree-Fock par exemple, il est facile de calculer la matrice $N_{\lambda\mu}(\beta)$ et son déterminant. La figure 10 donne le recouvrement $\langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle$ en fonction de β pour les états déformés $K = 0$ et $K = 1/2$ du ^{20}Ne et du ^{19}F ainsi que les fonctions $d^{J}_{KK}(\beta)$. On voit que les recouvrements s'étalent bien au-delà des valeurs $\beta \sim 0$ et $\beta \sim \pi$. Ils ont à peu près la même largeur que la fonction $d^{J}_{oo}(\beta)$ pour $J = 2$. On peut vérifier que pour $\beta \sim 0$ le recouvrement est bien approché par l'expression :

$$\langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle \sim e^{-\frac{\beta^2}{4}\left[\langle \Phi_K | \vec{J}^2 | \Phi_K \rangle - K^2 \right]} ,$$

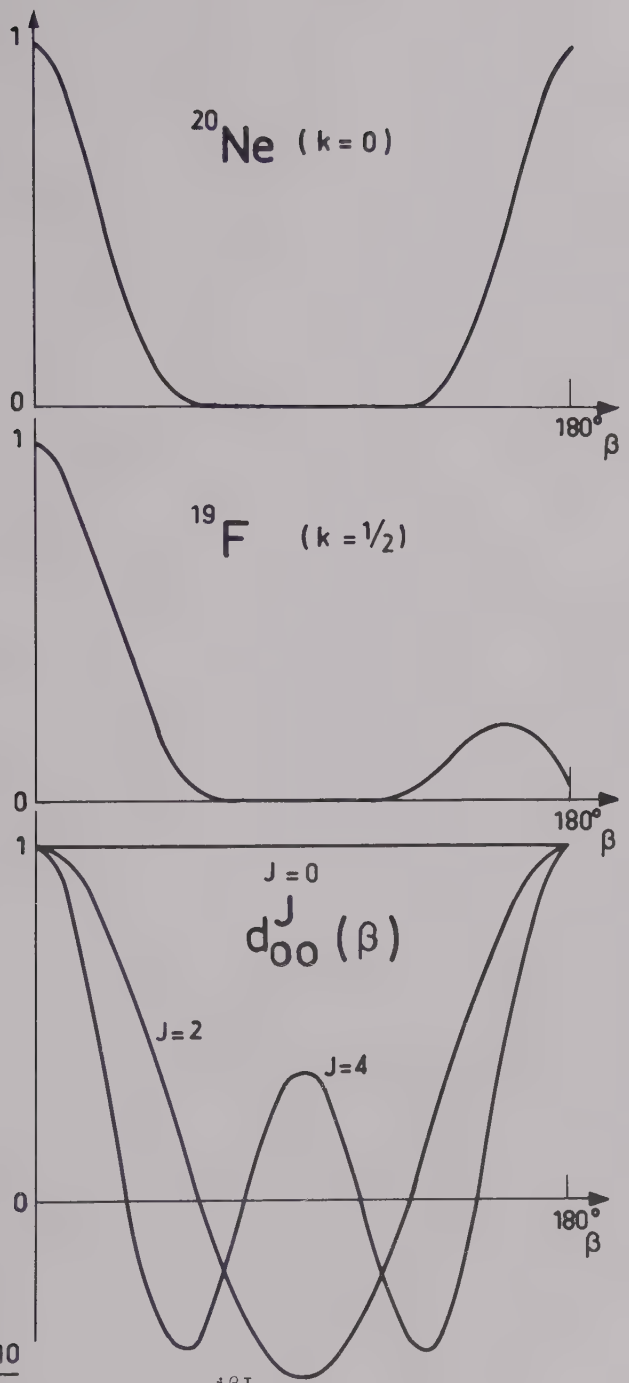


Figure 10

Les recouvrements $\langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle$ tracés en fonction de l'angle β pour le ^{20}Ne et le ^{19}F .

Le dernier dessin montre la fonction $d^J_{oo}(\beta)$ pour J = 0, 2 et 4 .

de sorte que la largeur du recouvrement est déterminée par la valeur moyenne de $\vec{J}^2$ dans l'état déformé $|\Phi_K\rangle$. Le tableau 4 donne la valeur moyenne de $\vec{J}^2$ pour toutes les solutions de symétrie axiale. Elle varie entre 15 et 25 . Dans les noyaux lourds, la valeur moyenne de $\vec{J}^2$ peut dépasser 100 de sorte que les recouvrements sont beaucoup plus concentrés autour des valeurs $\beta \sim 0$. Ainsi on peut dire que dans les noyaux légers de la couche 2s-1d la variable collective β n'est pas très bien définie et que le modèle adiabatique ne doit être utilisé qu'avec circonspection.

Le recouvrement $\langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} H | \Phi_K \rangle$ peut être calculé[10] en introduisant un ensemble complet d'états intermédiaires à deux particules et deux trous $|2p\ 2t\rangle$:

$$\langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle = \langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | \Phi_K \rangle \langle \Phi_K | H | \Phi_K \rangle$$

$$+ \sum_{2p-2t} \langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} | 2p\ 2t \rangle \langle 2p\ 2t | H | \Phi_K \rangle \quad . \tag{135}$$

Lorsque $|\Phi_K\rangle$ est un état de Hartree-Fock, les états intermédiaires à 1 particule et 1 trou ne contribuent pas car $\langle 1p\ 1t | H | \Phi_K \rangle = 0$. Les états à 3p-3t , 4p-4t , etc ... ne contribuent pas parce que le hamiltonien H est un opérateur à 2 corps. Les configurations 2p-2t sont limitées aux états d'une seule couche majeur car l'opérateur de rotation ne peut changer que le nombre quantique magnétique d'un état φ_{jm} . L'élément de matrice $\langle 2p\ 2t | H | \Phi_K \rangle$ se calcule aisément :

$$|2p\ 2t\rangle = b^\dagger_{\mu_1} b^\dagger_{\mu_2} b_{\lambda_1} b_{\lambda_2} |\Phi_K\rangle \quad ,$$

$$\langle 2p\ 2t | H | \Phi_K \rangle = \langle \mu_1\ \mu_2 | v | \lambda_1\ \lambda_2 \rangle \quad .$$

μ_1 et μ_2 sont des orbites vides appartenant à la même couche majeure que les orbites occupées λ_1 et λ_2. L'état $|2p-2t\rangle$ est aussi un déterminant de Slater de sorte que le recouvrement $\langle\Phi_K|e^{-i\beta J_y}|2p\ 2t\rangle$ est encore donné par l'équation (134) : il est égal au déterminant de la matrice des produits scalaires des orbites tournées de $|\Phi_K\rangle$ avec les orbites occupées dans l'état $|2p\ 2t\rangle$.

Le recouvrement $\langle\Phi_K|e^{-i\beta J_y}H|\Phi_K\rangle$ a une largeur autour de $\beta \sim 0$ et $\beta \sim \pi$ semblable à celle du recouvrement $\langle\Phi_K|e^{-i\beta J_y}|\Phi_K\rangle$ donné par la figure 10 [10]. Les équations (127) et (135) donnent l'expression suivante pour le spectre de rotation :

$$E_J = E_{HF} + \Delta_J$$

avec

$$\Delta_J = \frac{\displaystyle\int_0^\pi d\beta\ \sin\beta\ \ d^J_{KK}(\beta) \sum_{2p2t} \langle\Phi_K|e^{-i\beta J_y}|2p\ 2t\rangle\langle 2p\ 2t|H|\Phi_K\rangle}{\displaystyle\int_0^\pi d\beta\ \sin\beta\ \ d^J_{KK}(\beta)\langle\Phi_K|e^{-i\beta J_y}|\Phi_K\rangle} \quad . \qquad (136)$$

Lorsque les orbites λ n'appartiennent pas à une couche majeure d'un oscillateur isotrope le nombre d'états intermédiaires peut devenir trop grand et on peut alors utiliser l'expression suivante pour le recouvrement

$$\langle \Phi_K | e^{-i\beta J_y} H | \Phi_K \rangle = \det(N) \left\{ \sum_{\lambda\mu} \langle \lambda | t | \mu' \rangle \; N^{-1}_{\mu\lambda} \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2} \sum_{\lambda\mu\rho\sigma} \langle \lambda\mu | v | \rho'\sigma' \rangle \; N^{-1}_{\rho\lambda} \; N^{-1}_{\sigma\mu} \right\} ,$$

où N est la matrice (134) et N^{-1} est la matrice inverse. Les sommes sont limitées aux états occupés.

Le tableau 12 donne les distributions N_{JK} des moments cinétiques J dans les états déformés du ^{12}C, ^{20}Ne, ^{28}Si et ^{36}A. N_{JK} est égal à la valeur moyenne de l'opérateur de projection (117) dans l'état intrinsèque.

Nous avons calculé Δ_J à l'aide de l'expression (136). Les spectres de rotation obtenus pour les bandes de rotation $K = 0$ engendrées par les fonctions déformées (Tableau 4) du ^{12}C, ^{20}Ne, ^{28}Si et ^{36}Ar, sont donnés par la figure 11. Dans le ^{20}Ne la bande de rotation s'arrête à $J = 8$ car c'est le moment cinétique maximum que peuvent avoir deux neutrons et deux protons dans la couche 2s-1d. Tous les niveaux de cette bande ont été identifiés expérimentalement[29]. Le spectre obtenu en projetant l'état de Hartree-Fock est en bon accord avec le spectre expérimental. Mais on peut noter des désaccords systématiques entre les spectres calculés et les spectres expérimentaux. L'espacement entre les états $J = 0$ et $J = 2$ est toujours plus petit que la valeur expérimentale. Des calculs de diagonalisation exacte de Llano, Mello et al.[33] montrent que cet espacement est augmenté lorsqu'on ajoute à la force quadrupole-quadrupole une force d'appariement. Le désaccord entre les spectres expérimentaux et les spectres calculés est peut-être dû à une modification de la fonction d'onde produite par la force d'appariement. Les fonctions d'onde Hartree-Fock des noyaux pair-pairs $N = Z$ sont stables par rapport à la formation de paires du type B.C.S. . C'est-à-dire si on cherche à résoudre les équations de Hartree-Bogolioubov (en prenant

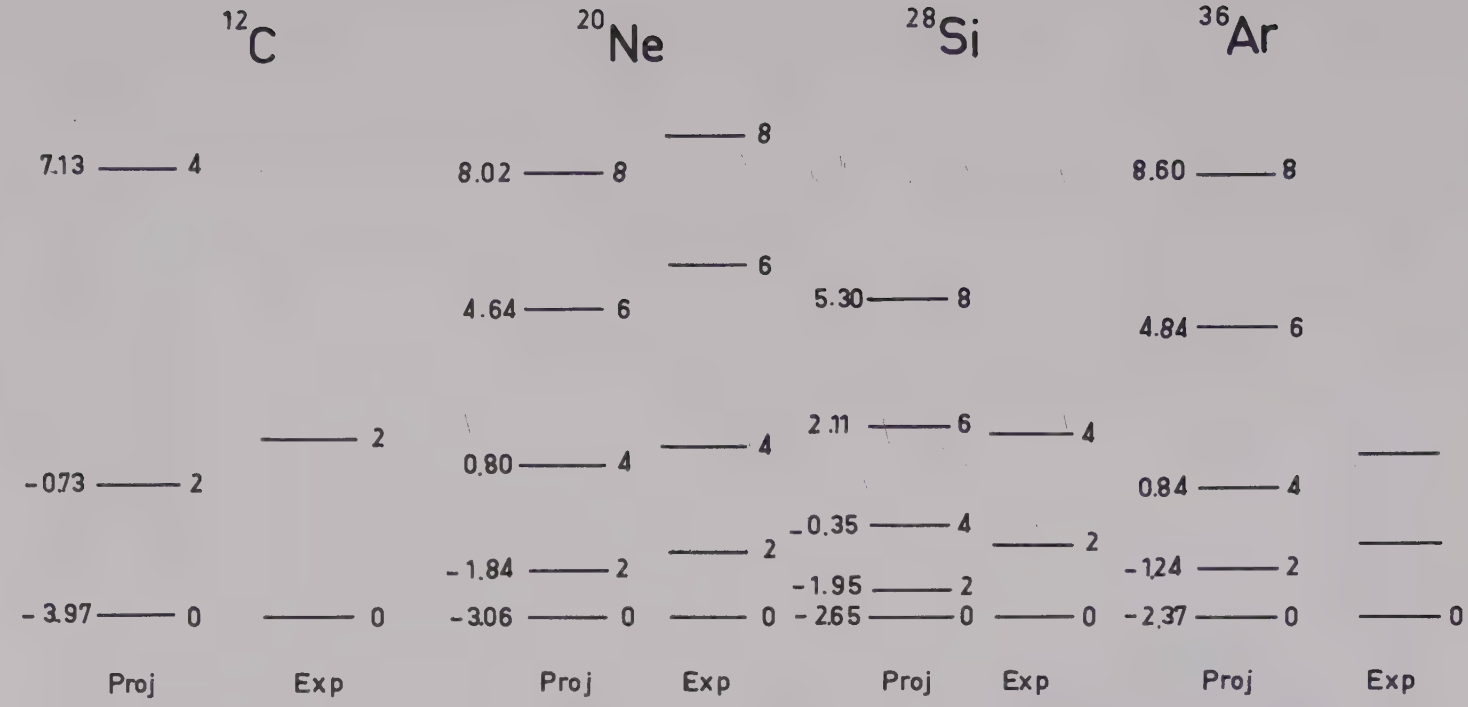


Figure 11

Les spectres de rotation obtenus en projetant les états déformés du ^{12}C , ^{20}Ne , ^{28}Si (aplati) et ^{36}Ar du tableau 4 . On compare le spectre obtenu (Proj.) avec le spectre expérimental (Exp.). Le nombre à gauche de chaque niveau est la différence Δ_J entre l'énergie de l'état projeté et l'énergie de Hartree-Fock de l'état déformé.

pour fonction d'essai une fonction d'onde, produit de neutrons et de protons), les solutions convergent vers la solution de Hartree-Fock[24]. Dans les noyaux les effets d'une force d'appariement ne peuvent pas se traiter dans le cadre de la théorie de Hartree-Bogolioubov simple. On montre aisément, par exemple que des état parasites dûs à la non-conservation du nombre de particules ne peuvent pas être négligés lorsque l'appariement est faible, c'est-à-dire lorsque la lacune en énergie due à l'appariement est petite par rapport à la lacune en énergie du spectre des orbites de Hartree-Fock.

Le spectre du ^{28}Si (Figure 11) est comprimé par un facteur presqu'égal à deux par rapport au spectre expérimental. Le spectre obtenu en projetant l'état déformé allongé est semblable. L'état de Hartree-Fock du ^{28}Si semble trop déformé car il a un trop grand moment d'inertie.

Les spectres obtenus par projection du moment cinétique peuvent être comparés aux spectres de rotation. Ils suivent d'assez près la forme $J(J+1)$ sauf pour les états dont le moment cinétique approche le maximum de la bande. Les moments d'inertie obtenus ont des valeurs intermédiaires entre celles obtenues par les formules d'Inglis[34] et de Thouless-Valatin[49]. La formule d'Inglis du moment d'inertie est

$$\theta = 2 \sum_{\mu\nu} \frac{|\langle \mu | J_x | \nu \rangle|^2}{e_\mu - e_\nu} \quad , \tag{138}$$

μ et ν sont respectivment les orbites occupées et vides. e_μ et e_ν sont les énergies de ces orbites. Dans le ^{28}Si le paramètre d'inertie obtenu par la formule d'Inglis est $A = 1/2\theta = 0{,}18$ MeV tandis que la valeur obtenue à partir du spectre projeté est $A = 0{,}11$ MeV. On voit sur l'équation (137) que la lacune en énergie entre les orbites vides et les orbites occupées affecte les moments d'inertie obtenus par la formule d'Inglis car elle augmente les dénominateurs.

On serait tenté d'en conclure que les moments d'inertie sont sensibles aux termes d'échange de la force dont on a montréedans le chapitre VI qu'ils déterminent la lacune en énergie. En effet, la figure 4 montre les spectres des orbites de Hartree-Fock du ^{28}Si obtenus avec une force de Serber et une force de Rosenfeld. Les lacunes en énergie sont respectivement 2,5 MeV et 6,6 MeV. Les moments d'inertie obtenus par la formule d'Inglis sont $A = 0,11$ MeV et $A = 0,18$ MeV. Les spectres projetés sont donnés par la figure 12. Ils sont très semblables, ce qui montre que la lacune en énergie n'a pas d'effet sensible sur le moment d'inertie. Ainsi, on ne peut pas faire confiance à la formule d'Inglis pour les noyaux légers. Notons que pour les fonctions d'onde du couplage L-S discutées dans le chapitre VI la force monopole qui a un effet important sur la lacune en énergie ne contribue pas à Δ_J.

Dans le cas du ^{19}F on peut comparer le spectre projeté avec le spectre obtenu par la diagonalisation exacte de toutes les configurations de trois nucléons dans la couche 2s-1d[15]. La diagonalisation donne la solution exacte dans l'espace de configurations limité à la couche 2s-1d. L'accord entre le spectre obtenu par projection est excellent jusqu'aux états de moment cinétique $J = 7/2$ (Fig.13). L'accord de ces spectres avec le spectre expérimental est également bon. Les spectres obtenus par diagonalisation et par projection ont bien la forme d'une bande de rotation $K = 1/2$. Le paramètre de découplage peut être obtenu par le rapport :

$$\frac{E_{3/2} - E_{1/2}}{E_{5/2} - E_{3/2}} = \frac{3(a+1)}{5(1-a)} \quad . \qquad (138)$$

Le spectre calculé soit par projection, soit par diagonalisation donne la valeur $a = 2,4$ tandis que la valeur (138) obtenue par le modèle adiabatique est $a = 1,7$. Nous en concluons que bien que les spectres obtenus par projection des états de Hartree-Fock ressemblent à des bandes de rotation et que dans le cas du

^{20}Ne et du ^{19}F l'accord avec les spectres expérimentaux soit bon, on peut douter de la validité de la fonction d'onde (114) du modèle adiabatique dans les noyaux de la couche 2s-1d .

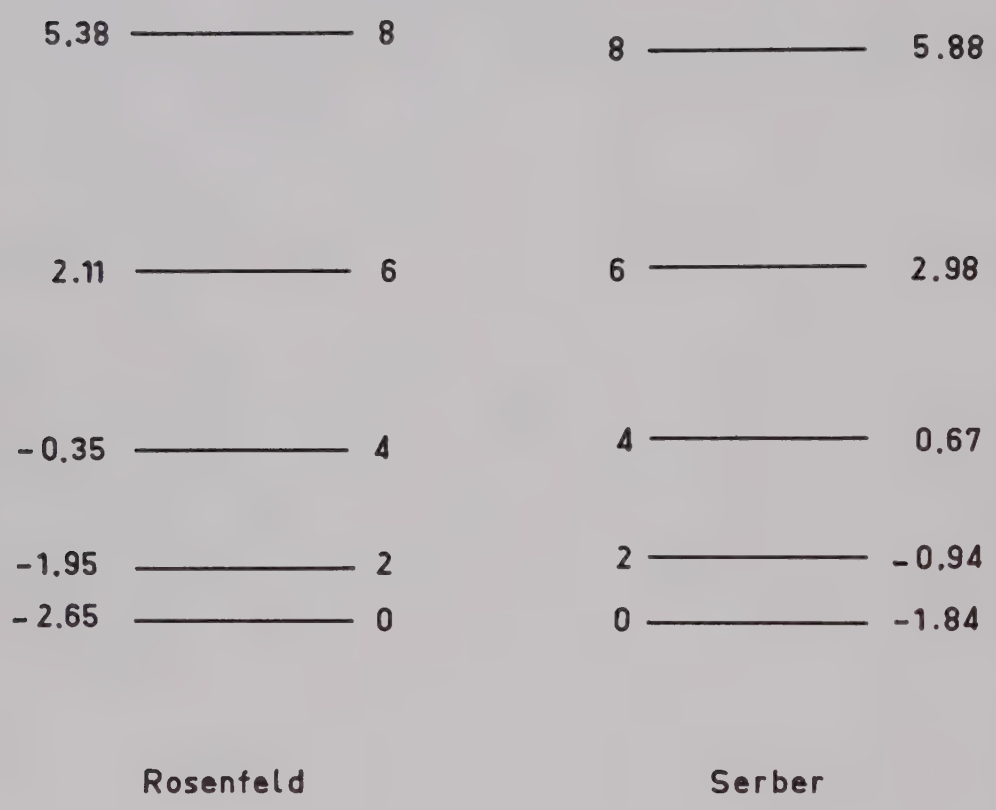


Figure 12 Une comparaison entre les spectres de rotation obtenus par projection de l'état de Hartree-Fock du ^{28}Si (aplati) en utilisant les forces de Rosenfeld et de Serber. Le nombre à gauche de chaque niveau est le même que dans la figure 11.

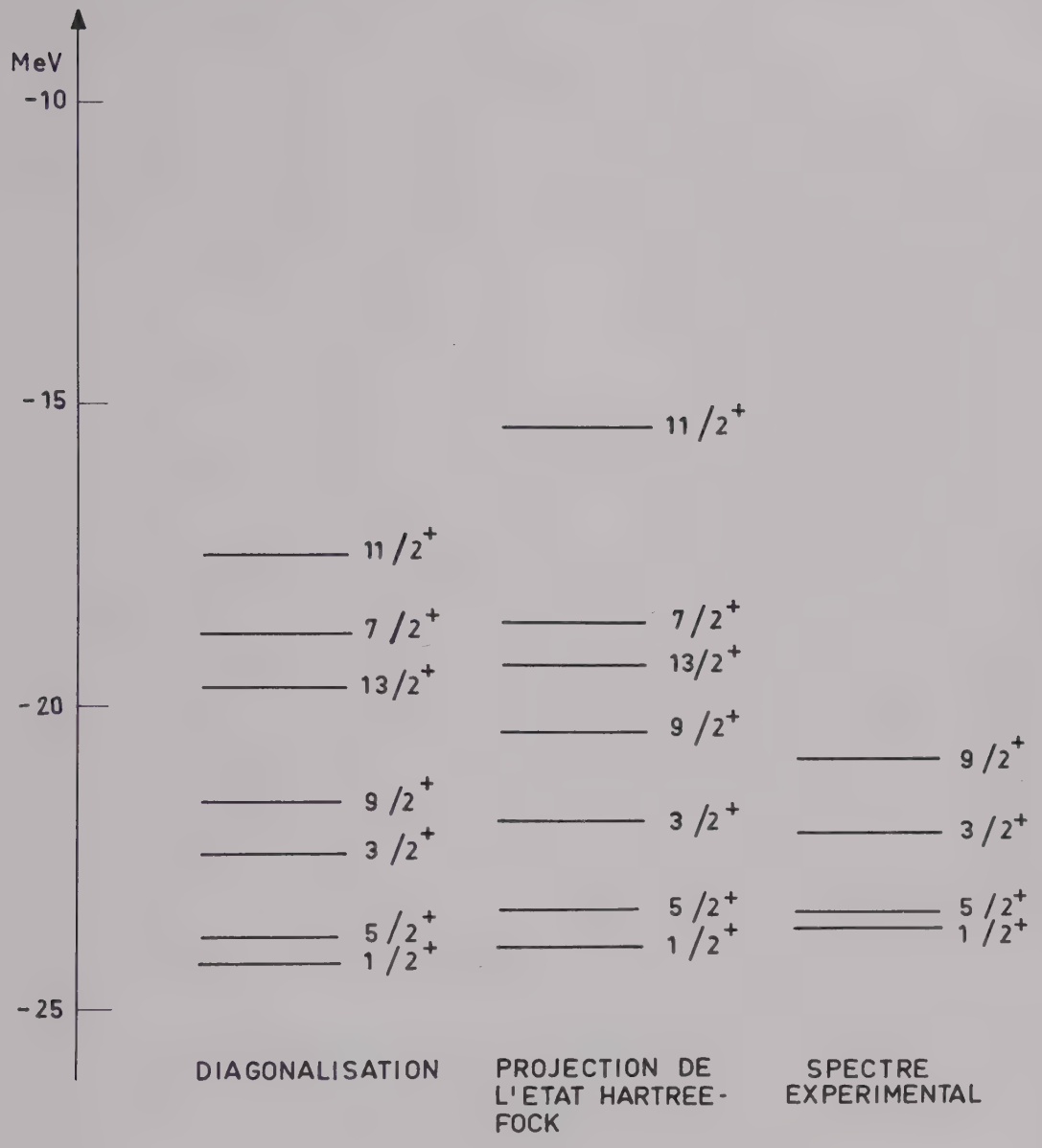


Figure 13 Une comparaison entre les spectres obtenus en projetant l'état de Hartree-Fock du ^{19}F et en diagonalisant les configurations à trois particules dans la couche 2s-1d avec la même force[10,15]. Pour le spectre obtenu par diagonalisation on ne montre que les états les plus bas de chaque moment cinétique. Le spectre expérimental est dessiné à droite.

CHAPITRE XIII

LES CALCULS DE HARTREE-FOCK SANS RESTRICTION A UNE COUCHE MAJEURE : LA POLARISATION QUADRUPOLAIRE DES COUCHES COMPLÈTES

Les calculs de Hartree-Fock dans une couche majeure tout en étant riches en renseignements sont nécessairement limités. Les états de Hartree-Fock obtenus ne sont pas stables par rapport aux excitations particule-trou d'une couche majeure à une autre. Toutes les configurations appartenant à une même couche majeure d'un oscillateur harmonique isotrope ont la même énergie cinétique de sorte qu'un calcul de Hartree-Fock dans une couche majeure ne peut au mieux que minimiser l'énergie potentielle. L'énergie cinétique de chaque orbite est entièrement déterminée par la constante α_o de l'oscillateur harmonique qui à son tour est déterminée par le rayon quadratique moyen du noyau. Il est bien connu que l'^{17}O a un moment quadrupolaire électrique égal à $-2{,}6\ fm^2$ ($= -0{,}026$ barns). Le neutron dans la couche 2s-1d n'a pas de charge électrique et ne peut donc pas contribuer au moment quadrupolaire. On pense que le moment quadrupolaire observé est dû à la polarisation de la couche complète de ^{16}O par le neutron impair[35]. Le ^{21}Ne a un moment quadrupolaire électrique égal à $\sim 9\ fm^2$. Avec une fonction d'onde qui résulte d'un calcul de Hartree-Fock dans une couche majeure, ce moment quadrupolaire ne peut provenir que des deux protons dans la couche 2s-1d. Or le moment quadrupolaire maximum que peuvent avoir deux protons dans la couche 2s-1d est celui qui est obtenu en les plaçant dans l'orbite $(n_x, n_y, n_z) = (0\ 0\ 2)$. Le moment quadrupolaire de l'état déformé est alors :

$$Q_o = \langle \Phi_K | \sum_{i=1}^{Z} (2z_i^2 - x_i^2 - y_i^2) | \Phi_K \rangle$$

$$= 2 \langle 002 | 2z^2 - x^2 - y^2 | 002 \rangle = \frac{6}{\alpha_o^2} \quad . \tag{139}$$

Si nous prenons la valeur $\alpha_o = 0{,}56\ fm^{-1}$ donnée par le tableau 2, on obtient $Q_o = 19\ fm^2$. Dans un noyau déformé le moment quadrupolaire d'un état de moment cinétique J appartenant à une bande de rotation engendrée par un état déformé $|\Phi_K\rangle$ est donné par[1] :

$$Q = \frac{3K^2 - J(J+1)}{(J+1)(2J+1)} Q_o \quad . \tag{140}$$

Cette expression peut être obtenue à partir de l'équation (119). Le fondamental du ^{21}Ne correspond à $J = K = 3/2$ de sorte que la valeur maxima $19\ fm^2$ de Q_o donne un moment quadrupolaire égal à $3{,}8\ fm^2$ pour l'état fondamental du ^{21}Ne, ce qui est moins que la moitié de la valeur expérimentale. A la lumière des résultats du chapitre précédent, on pourrait douter de la validité de l'équation (114) qui résulte du modèle adiabatique. Mais le désaccord entre la valeur calculée et la valeur expérimentale est assez grand pour être significatif .L'équation (119) donne aussi une relation entre la probabilité B(E2) de la transition $2^+ \rightarrow 0^+$ du ^{20}Ne et le moment quadrupolaire Q_o de l'état déformé :

$$B(E2) = \frac{5}{16\pi} e^2 Q_o^2 \quad . \tag{141}$$

Dans le ^{20}Ne le moment quadrupolaire Q_o , calculé avec l'équation (141) et la valeur expérimentale du B(E2) , est égal à 69 fm^2 . La valeur de Q_o calculée avec l'équation (140) et la valeur expérimentale de Q est égale à 45 fm^2 . Ces deux valeurs sont bien plus grandes que la valeur maxima 19 fm^2 qui peut être obtenue avec un calcul de Hartree-Fock dans une couche majeure. Mais la différence entre les deux valeurs n'est pas expliquée par le modèle adiabatique utilisé.

Pour permettre aux couches complètes de contribuer à la déformation quadrupolaire il est nécessaire de lever les restrictions (46) sur le développement des orbites. Il est nècessaire de permettre à chaque orbite dont les composantes principales appartiennent à une couche majeure d'avoir aussi des composantes appartenant aux couches majeures voisines de même parité. Ainsi pour les noyaux ($A \leq 40$) jusqu'au ^{40}Ca le développement (26) des orbites doit inclure les états suivants :

$$j = 1s^{1/2},\ 1d^{5/2},\ 2s^{1/2},\ 1d^{3/2},\ 1g^{9/2},\ 2d^{5/2},\ 3s^{1/2},\ 2d^{3/2},\ 1g^{7/2}$$

pour les orbites de parité positive ;

$$j = 1p^{3/2},\ 1p^{1/2},\ 1f^{7/2},\ 2p^{3/2},\ 2p^{1/2},\ 1f^{5/2}$$

pour les orbites de parité négative . (142)

Avec le développement plus complet (142) on perd plusieurs des simplifications des calculs de Hartree-Fock dans une couche majeure décrits dans le chapite IV . Le rayon quadratique moyen n'est plus entièrement déterminé par la constante α_o de l'oscillateur harmonique car le mélange d'états appartenant à des couches majeures différentes change le rayon quadratique de chaque orbite. On rencontre ainsi le problème de la stabilité radiale du noyau et le choix d'une force effective devient critique. Il est bien connu qu'une force avec un coeur dur répulsif ne peut pas être utiliséepour un calcul de Hartree-Fock. Il y a actuel-

lement de nombreux travaux pour déterminer une force effective[36]. Ces travaux qui ne sont pas terminés cherchent surtout à expliquer les énergies de liaison et les rayons d'équilibre des noyaux. Nous n'aborderons pas cette question.

Les déformations des noyaux sont dues, en grande partie, à la composante quadrupole-quadrupole de la force. Elle est de longue portée et il est raisonnable de penser que des déformations semblables seront obtenues avec des forces qui ne diffèrent que par la façon dont est éliminée la forte répulsion à courte portée. Cela revient à faire l'hypothèse que les corrélations de deux nucléons à courte portée n'affectent pas la déformation quadrupolaire des noyaux. Enfin, il n'est plus possible d'utiliser les énergies ε_j expérimentales dans le hamiltonien de Hartree-Fock. En effet, dans ^{17}O, la polarisation de la couche complète ^{16}O est due au mélange d'états de la couche $2p\text{-}1f$ aux orbites de la couche $1p$. Ainsi l'équation (47) cesse d'être valable et il faut diagonaliser le hamiltonien de Hartree-Fock (27).

Nous avons diagonalisé le hamiltonien Hartree-Fock (27) en utilisant une force de Volkov[5] :

$$v = v(r) \{0,29 + 0,2\, P_\sigma - 0,05\, P_\tau + 0,71\, P_x\}$$

$$v(r) = -78\, e^{-(r/1,5)^2} + 82,5\, e^{-(r/0,8)^2} \text{ MeV} . \qquad (143)$$

Cette force est une somme de deux gaussiennes. Une attractive de longue portée, l'autre répulsive de courte portée. Cette force a été utilisée avec succès par A. Volkov[5] pour le calcul des formes d'équilibre des noyaux de la couche $1p$. La force de Volkov ne rend pas bien compte des propriétés de saturation des noyaux. Déjà, dans la deuxième moitié de la couche $2s\text{-}1d$ elle donne des rayons d'équilibre trop petits et nous ne l'utiliserons que pour discuter les déformations quadrupolaires des états de Hartree-Fock obtenus. En outre les forces

centrales ne permettent pas d'expliquer la présence d'une interaction spin-orbite dans les noyaux voisins des couches complètes. Nous avons donc ajouté un terme spin-orbite au hamiltonien de Hartree-Fock :

$$\langle jm|\, h\, |j'm'\rangle = \langle jm|\, t'\, |j'm'\rangle + \sum_{\lambda=1}^{A} \langle jm,\lambda|\, v\, |j'm',\lambda\rangle$$

$$\text{où} \quad t' = \frac{p^2}{2m} + a\, \vec{\ell}.\vec{s} \quad . \tag{144}$$

L'intensité a du terme spin-orbite a été choisie de façon à reproduire les valeurs observées dans ^{15}O et ^{17}O . Les déformations quadrupolaires ne sont pas très sensibles à ce terme. Les équations de Hartree-Fock ont été résolues en prenant des valeurs successives de la constante α_o de l'oscillateur harmonique jusqu'à ce que l'énergie de Hartree-Fock soit minima par rapport aux variations infinitésimales des coefficients C_j^λ et de la constante de l'oscillateur harmonique.

Il est commode de définir la déformation D par le rapport entre le moment quadrupolaire Q_o et le moment monopolaire $\langle r^2\rangle$:

$$Q_o = \langle \Phi_K|\, \sum_{i=1}^{Z} (2z_i^2 - x_i^2 - y_i^2)\, |\Phi_K\rangle = \sum_{\lambda=1}^{Z} \langle \lambda|\, 2\tilde{z}^2 - x^2 - y^2\, |\lambda\rangle$$

$$\langle r^2\rangle = \langle \Phi_K|\, \sum_{i=1}^{Z} r_i^2\, |\Phi_K\rangle = \sum_{\lambda=1}^{Z} \langle \lambda|\, r^2\, |\lambda\rangle$$

$$D = \frac{Q_o}{\langle r^2\rangle} \quad . \tag{145}$$

Lorsque la déformation est petite la déformation D est reliée au paramètre de déformation β de Nilsson[4] par la relation :

$$D = 1{,}26\,\beta \quad . \tag{146}$$

Le rayon quadratique moyen $r_{q.m.}$ est relié au moment monopolaire $\langle r^2 \rangle$ par la relation

$$r_{q.m.} = \sqrt{\frac{\langle r^2 \rangle}{Z}} \quad . \tag{147}$$

Dans les équations (145) les sommes sont limitées aux orbites des protons. La déformation D est un nombre sans dimension qui ne varie pas beaucoup avec la dimension du noyau. La Figure 14 montre les variations de l'énergie de H.F., de la déformation D et du moment monopolaire de la solution du ^{20}Ne en fonction la constante α de l'oscillateur harmonique. On voit que pour la valeur de α qui minimise l'énergie, la déformation est près de sa valeur maxima.

Le tableau 13 montre les effets de la polarisation des couches complètes sur la déformation quadrupolaire D. Le tableau compare les déformations des solutions à symétrie axiale obtenues dans un calcul de Hartree-Fock dans une couche majeure avec celles qui sont obtenues avec le développement (142) des orbites qui permet le mélange des couches majeures. On voit que les déformations positives (allongées) doublent leur valeur tandis que les déformations négatives augmentent d'environ 65 %. On utilise le concept de charge effective pour exprimer l'augmentation du moment quadrupolaire qui résulte de la polarisation de la couche complète. La charge effective est égale à la charge électrique qu'il faudrait ajouter aux neutrons et aux protons de la couche 2s-1d pour obtenir le même moment quadrupolaire sans la polarisation de la couche complète.

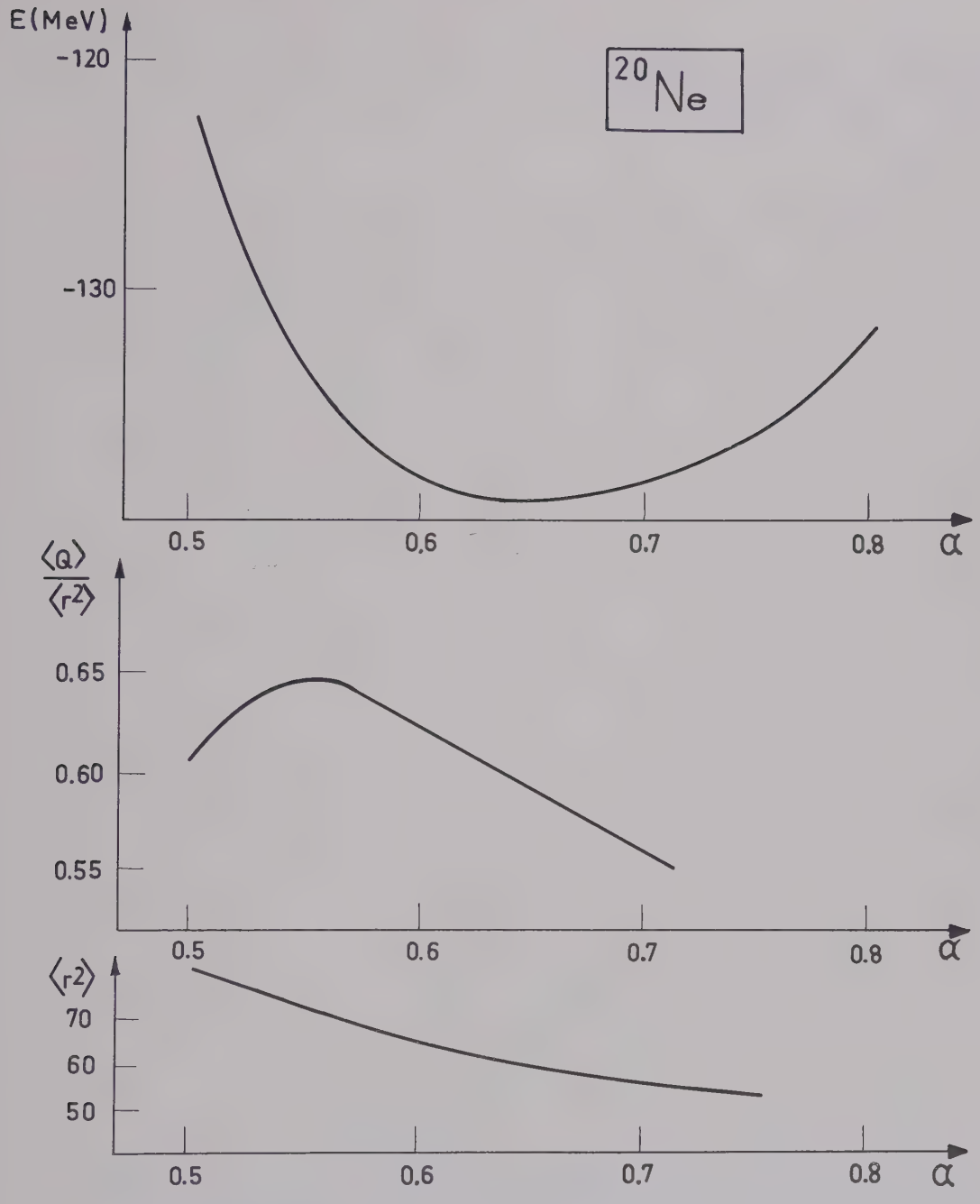


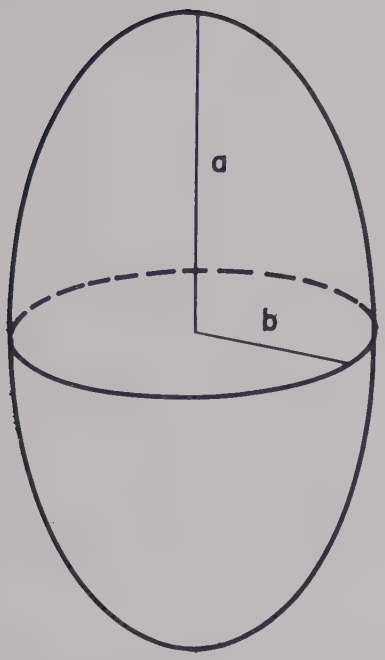
Figure 14 Variation de l'énergie de Hartree-Fock E, de la déformation $\langle Q \rangle / \langle r^2 \rangle$ et du moment monopolaire $\langle r^2 \rangle$ du ^{20}Ne avec la constante α de l'oscillateur. Les courbes sont obtenues en résolvant les équations Hartree-Fock pour des valeurs successives de α .

Le calcul Hartree-Fock avec mélange de couches majeures et un calcul microscopique de la charge effective et nous obtenons la valeur $\frac{1}{2}$ e pour les déformations positives.

Les déformations obtenues sont assez grandes. On peut s'en rendre compte en comparant l'état de Hartree-Fock à une ellipsoïde de révolution (Fig.15). Le grand axe a et le petit axe b de l'ellipsoïde sont choisis de façon à ce que les moments monopolaire $\langle r^2 \rangle$ et quadrupolaire Q_o de l'ellipsoïde et de l'état de Hartree-Fock soient égaux. Le volume de l'ellipsoïde est égal à $(4/3)\,\pi\,R^3$ où $R^3 = ab^2$. Le tableau 14 donne le rapport a/b des axes et le rayon équivalent R de l'ellipsoïde qui correspond aux solutions de ^{16}O , ^{20}Ne et ^{28}Si . Dans le cas du ^{28}Si le rapport a/b varie d'un facteur deux quand on passe de la forme aplatie à la forme allongée, tandis que R reste remarquablement constant. La constance de R est une mesure de l'incompressibilité du noyau. Plus précisément l'augmentation du moment monopolaire avec la déformation est très semblable à celle d'un liquide incompressible.

Les déformations obtenues sont compatibles avec les moments quadrupolaires statiques des noyaux impairs. Le tableau 15 donne les moments quadrupolaires calculés avec l'équation (140) . Pour éliminer les erreurs sur l'estimation du rayon du noyau, nous avons calculé le moment quadrupolaire Q_o en utilisant la déformation D de la fonction de Hartree-Fock et la valeur expérimentale du rayon quadratique. Nous n'avons évidemment pas utilisé de charge effective.

Il est intéressant de comparer la fonction d'onde d'un calcul de Hartree-Fock avec mélange de couches majeures avec le modèle que Mottelson[35] a proposé pour expliquer la polarisation des couches complètes. Dans ce modèle on suppose que les orbites sont (n_x, n_y, n_z) d'un oscillateur harmonique déformé. Quatre nucléons remplissent chaque orbite comme dans la Figure 3. Soient ω_x, ω_y et ω_z les fréquences de l'oscillateur dans les directions x, y et z . Les moments quadrupolaire et monopolaire de l'état déformé sont alors :



$$R^3 = ab^2$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{R^2}{5}\left[\left(\frac{a}{b}\right)^{4/3} + 2\left(\frac{b}{a}\right)^{2/3}\right]$$

$$Q_o = \frac{2R^2}{5}\left[\left(\frac{a}{b}\right)^{4/3} - \left(\frac{b}{a}\right)^{2/3}\right]$$

Figure 15 L'ellipsoïde de révolution qui est comparée aux états déformés calculés. On a exprimé le moment monopolaire et le moment quadrupolaire de l'ellipsoïde en fonction du rapport a/b du grand et petit axes et du rayon équivalent $R = \sqrt[3]{ab^2}$.

$$Q_o = \frac{2\hbar}{m}\left[\frac{2N_z}{\omega_z} - \frac{N_x}{\omega_x} - \frac{N_y}{\omega_y}\right]$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{2\hbar}{m}\left[\frac{N_x}{\omega_x} + \frac{N_y}{\omega_y} + \frac{N_z}{\omega_z}\right]$$

où N_x, N_y et N_z sont définis par l'équation (98) en fonction du nombre total de quanta dans les trois directions. Une comparaison entre cet état déformé et l'éllipsoïde de la Figure (15) montre que le volume de l'éllipsoïde est déterminé par :

$$\omega_o^3 = \omega_x\ \omega_y\ \omega_z \quad . \tag{148}$$

L'oscillateur déformé représente le champ moyen déformé. Dans le modèle de Mottelson on fait l'hypothèse que les axes principaux du potentiel moyen sont dans le même rapport que les axes principaux de la distribution de matière dans le noyau. Les axes principaux du potentiel sont proportionnels à $\frac{1}{\omega_x}$, $\frac{1}{\omega_y}$ et $\frac{1}{\omega_z}$. Les axes principaux de la distribution de matière $\langle x^2\rangle^{1/2}$, $\langle y^2\rangle^{1/2}$ et $\langle z^2\rangle^{1/2}$ sont proportionnels à $\left(\frac{N_x}{\omega_x}\right)^{1/2}$, $\left(\frac{N_y}{\omega_y}\right)^{1/2}$ et $\left(\frac{N_z}{\omega_z}\right)^{1/2}$.

Ainsi dans le modèle de Mottelson les rapports des axes du potentiel sont donnés par la relation :

$$N_x\,\omega_x = N_y\,\omega_y = N_z\,\omega_z = \omega_o^3\,\sqrt[3]{N_x\,N_y\,N_z} \quad , \tag{149}$$

tandis que pour un oscillateur isotrope

$$\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega_o \quad . \tag{150}$$

Les moments quadrupolaire et monopolaire dans un oscillateur isotrope sont :

$$Q_o = \frac{2\hbar}{m\omega_o}\left[2N_z - N_x - N_y\right] , \tag{151}$$

$$r^2 = \frac{2\hbar}{m\omega_o}\left[N_x + N_y + N_z\right] . \tag{152}$$

Dans le modèle de Mottelson ils sont donnés par :

$$Q_o = \frac{2\hbar}{m\omega_o} \frac{1}{\sqrt[3]{N_x N_y N_z}} \left[2N_z^2 - N_x^2 - N_y^2\right]$$

$$\langle r^2 \rangle = \frac{2\hbar}{m\omega_o} \frac{1}{\sqrt[3]{N_x N_y N_z}} \left[N_x^2 + N_y^2 + N_z^2\right] .$$

Les déformations quadrupolaires obtenues avec un oscillateur isotrope doivent être comparées à celles qui résultent d'un calcul de Hartree-Fock dans une couche majeure. Les déformations quadrupolaires qui sont obtenues avec un oscillateur déformé doivent être comparées avec celles qui résultent d'un calcul de Hartree-Fock avec mélange de couches majeures. Cette comparaison est donnée dans le tableau 16, pour le cas du ^{20}Ne . La valeur de ω_o a été choisie de façon à ce que les ellipsoïdes qui correspondent aux fonctions d'onde du modèle et aux fonctions d'onde de Hartree-Fock aient le même rayon R . On a vu que R varie très peu de sorte que ω_o reste constant quand les fréquences de l'oscillateur varient. Le tableau 16 donne les contributions des orbites des couches 1s, 1p et 2s-1d au moment quadrupolaire du ^{20}Ne. Dans un oscillateur isotrope les couches complètes 1s et 1p n'ont pas de moment quadrupolaire et

toute la déformation vient de l'orbite de la couche 2s-1d . Lorsque l'oscillateur est déformé (et dans un calcul de Hartree-Fock avec mélange des couches majeures) 30 % du moment quadrupolaire vient des couches 1s et 1p. Le moment quadrupolaire de l'orbite de la couche 2s-1d augmente aussi par un effet de polarisation mutuelle.

Il y a un excellent accord entre les déformations obtenues par un calcul de Hartrée-Fock et par le modèle de Mottelson. On doit donc obtenir les mêmes déformations avec un calcul de Hartree-Fock dans lequel le développement des orbites est limité aux états (n_x, n_y, n_z) appartenant à une seule couche majeure d'un oscillateur déformé. Les paramètres variationels de la fonction d'onde sont alors les coefficients C_j^λ et les fréquences de l'oscillateur[25].

On peut remarquer que l'équation (149) qui donne le rapport des axes en fonction de la configuration $\{N_x, N_y, N_z\}$ est aussi obtenue en minimisant l'énergie cinétique du système "à volume constant", c'est-à-dire avec ω_o constant. Il est commode d'écrire :

$$\omega_x = e^{\alpha}\,\omega_o \qquad \omega_y = e^{\beta}\,\omega_o \qquad \text{et} \qquad \omega_z = e^{-(\alpha+\beta)}\,\omega_o \quad . \tag{153}$$

L'énergie cinétique du système est :

$$T(\alpha,\beta) = 2\hbar\omega_o \left[N_x\, e^{\alpha} + N_y\, e^{\beta} + N_z\, e^{-(\alpha+\beta)} \right] \quad . \tag{154}$$

L'énergie cinétique est minima lorsque :

$$\frac{\partial T}{\partial \alpha} = \frac{\partial T}{\partial \beta} = 0 \quad , \tag{155}$$

ce qui donne immédiatement la relation (149) du modèle de Mottelson. Ainsi, le modèle de Mottelson donne la déformation correcte lorsque l'énergie potentielle est indépendante de α et de β[47], car l'équation (155) minimise l'énergie totale dans ce cas. En outre, au minimum l'énergie cinétique a la valeur

$$T_{min} = \hbar\omega_o \sqrt[3]{N_x N_y N_z} \quad . \qquad (156)$$

Ainsi l'énergie cinétique est minima pour la configuration $\{N_x, N_y, N_z\}$ dont le produit $N_x N_y N_z$ est minimum. Le tableau 9 montre que cela se produit pour les configurations de poids maximum G . Or les états de poids maximum sont justement ceux qui minimisent l'énergie potentielle d'une force quadrupole-quadrupole dans un oscillateur isotrope[13]. Toutes les configurations ont la même énergie cinétique dans un oscillateur isotrope. On en conclut que si l'énergie potentielle ne varie pas pendant qu'on déforme l'oscillateur, les états de poids maximum continuent à minimiser l'énergie potentielle et une seule configuration minimise à la fois l'énergie cinétique et l'énergie potentielle.

En prenant $\hbar\omega_o = 13$ MeV dans le ^{20}Ne la déformation de la couche complète abaisse l'énergie cinétique de 7 MeV. Notons que les formes allongée et aplatie du ^{28}Si qui correspondent à $(\lambda,\mu) = (12, 0)$ et $(0, 12)$ n'ont pas la même énergie cinétique au minimum (à volumes égaux). En prenant $\hbar\omega_o = 12{,}4$ MeV dans le ^{28}Si, l'énergie cinétique de la forme aplatie est 2,5 MeV au-dessous de celle de la forme allongée.

Il est possible de visualiser les formes d'équilibre obtenues des noyaux en traçant des sections planes de surfaces d'équidensité de matière. La densité de matière est donnée par l'élément diagonal de l'opérateur densité (16) dans l'espace des configurations à savoir :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\lambda} \left| \sum_{jm} C^{\lambda}_{jm} \varphi_{jm\tau_\lambda}(\vec{r}) \right|^2$$

où $\varphi_{j\pi\tau}(\vec{r})$ est défini dans l'Appendice A.

Pour les solutions de symétrie axiale les surfaces d'équidensité ont la symétrie de révolution autour de l'axe de symétrie. Les figures 16-24 montrent les sections des surfaces d'équidensité sur un plan contenant l'axe de symétrie. Les surfaces d'équidensité qui résultent d'un calcul sans mélange de couches majeures ont la même forme et la même structure que celles qui résultent d'un calcul complet permettant le mélange de couches majeures.

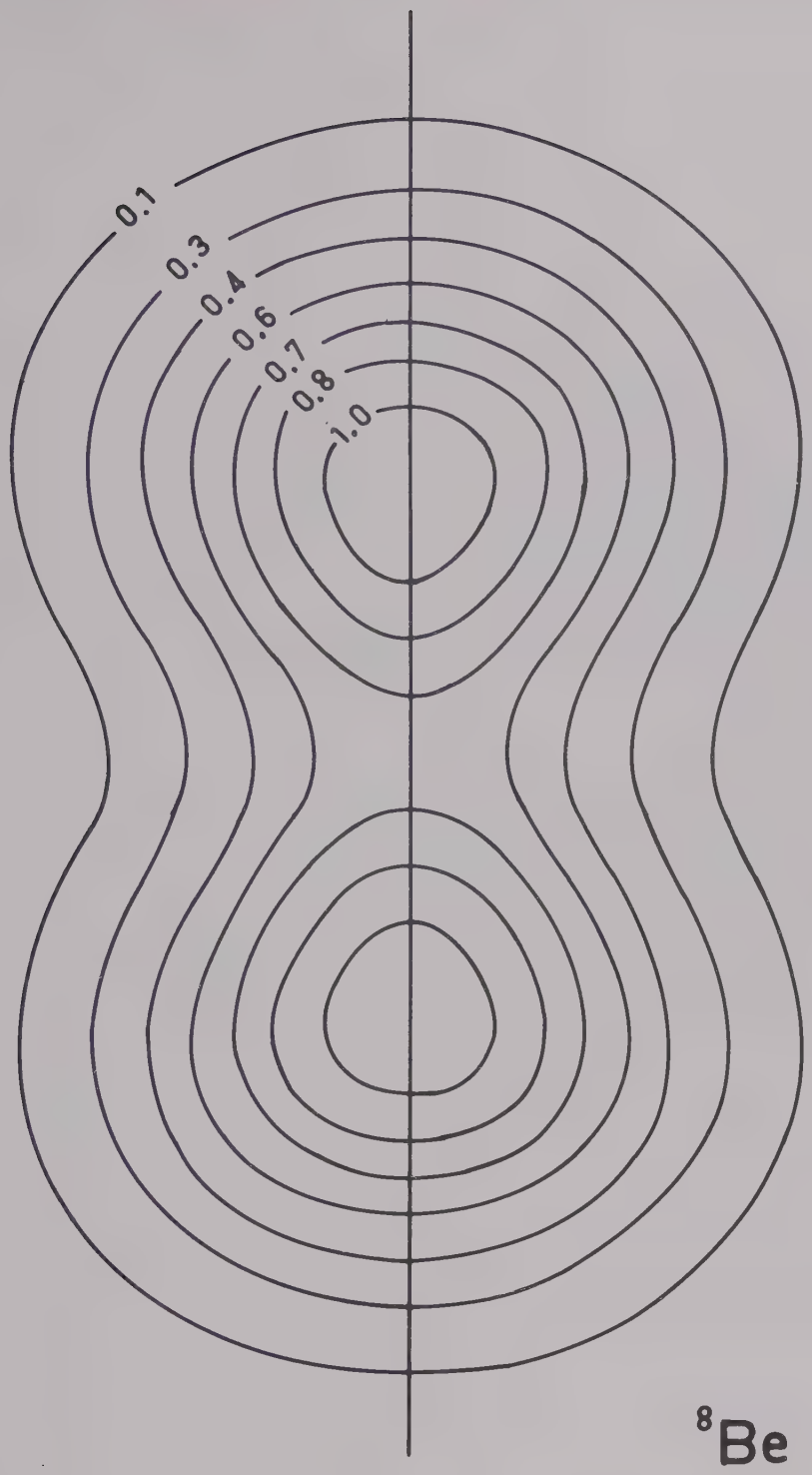


Figure 16 Sur les figures 16-24, l'échelle des longueurs le long de l'axe de symétrie est 12% plus petite que l'échelle des longueurs dans la direction perpendiculaire.

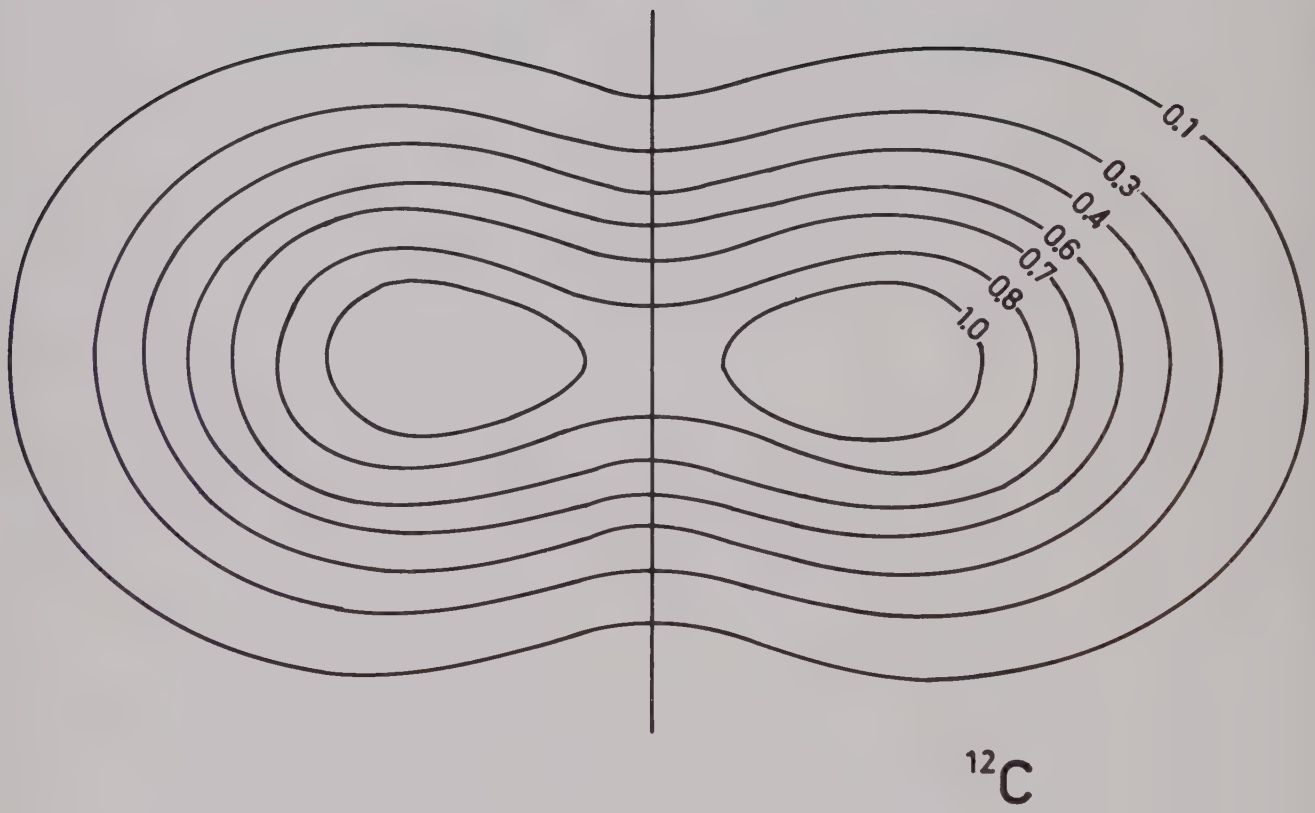


Figure 17

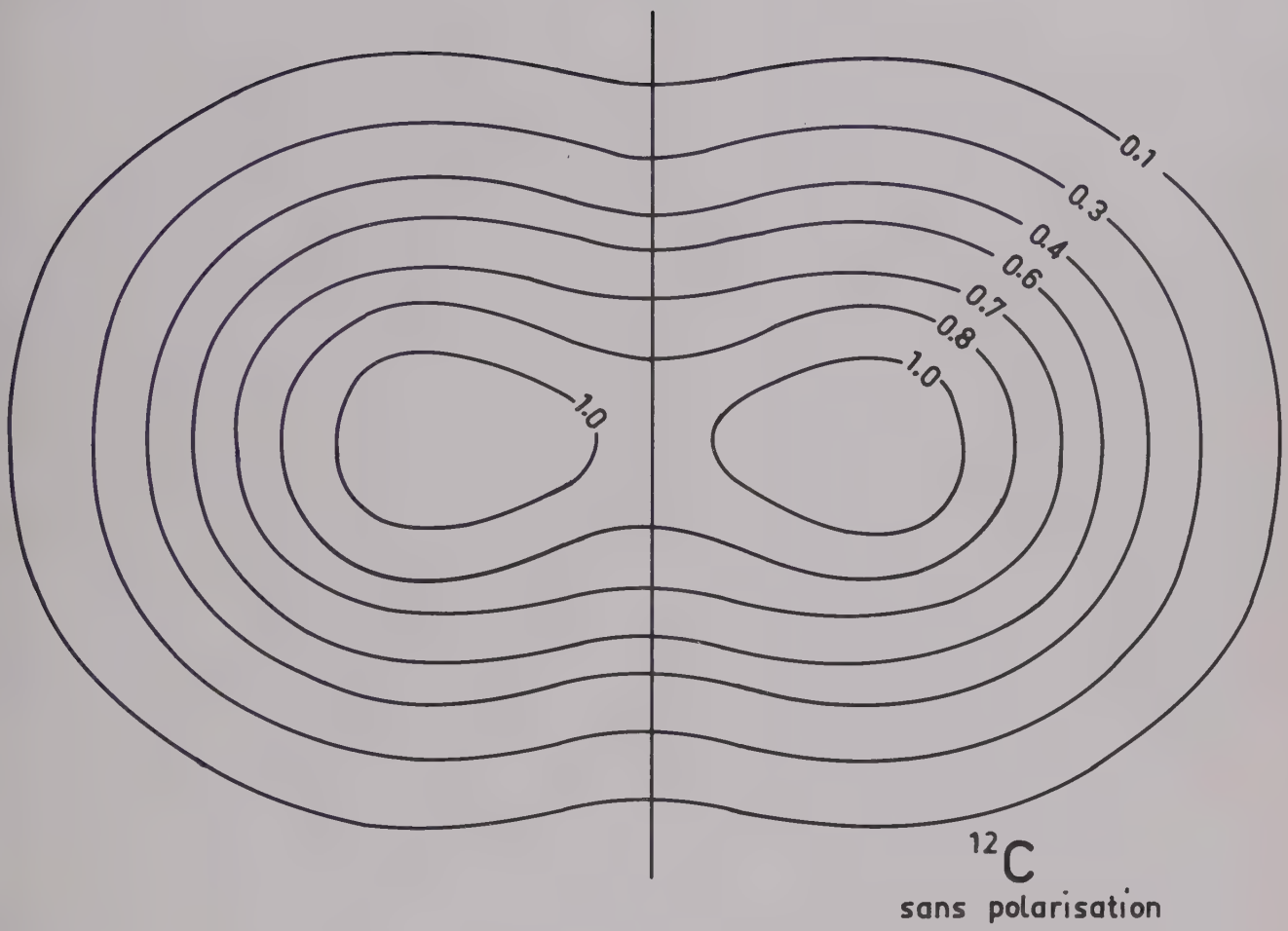


Figure 18

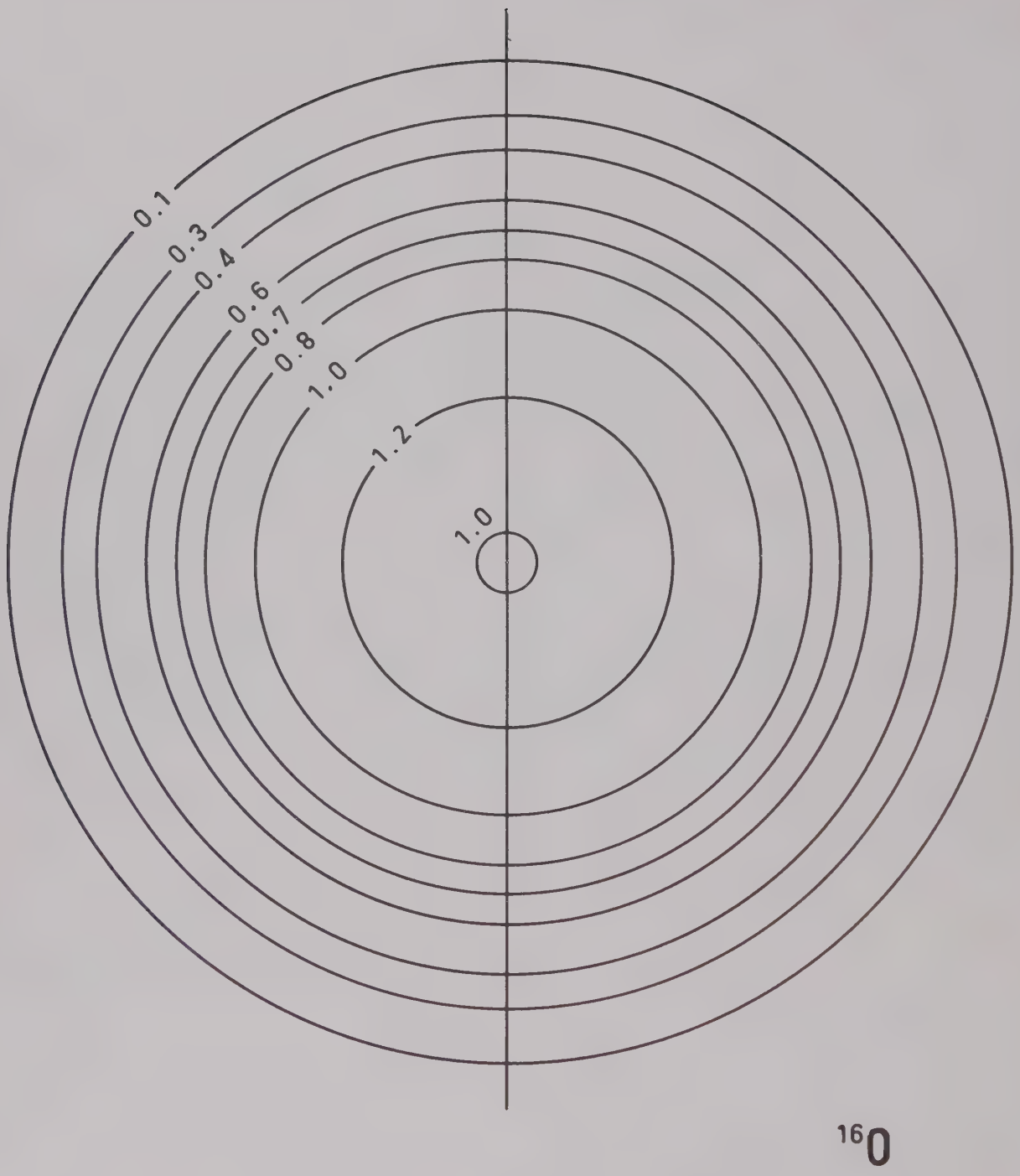


Figure 19

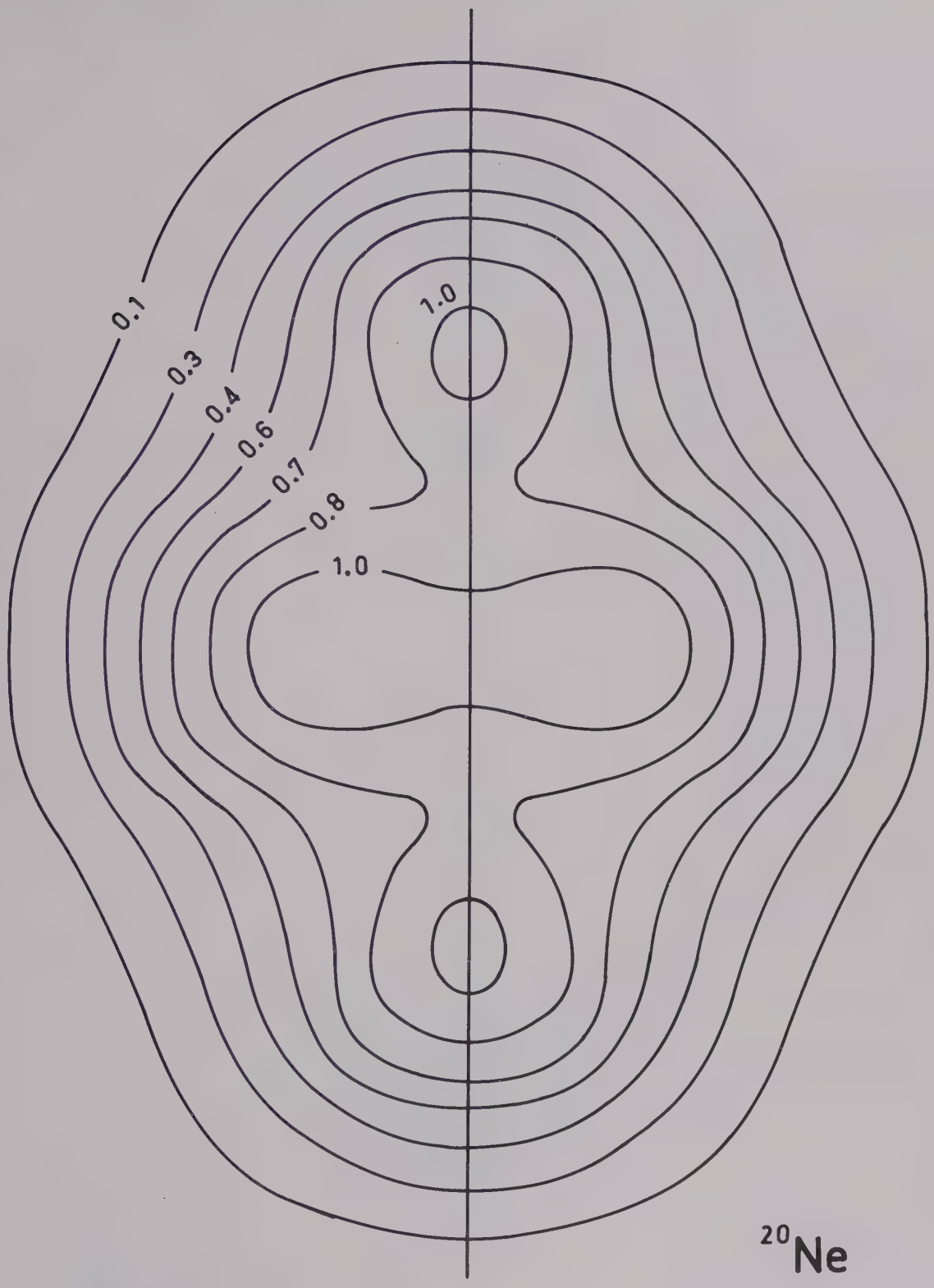


Figure 20

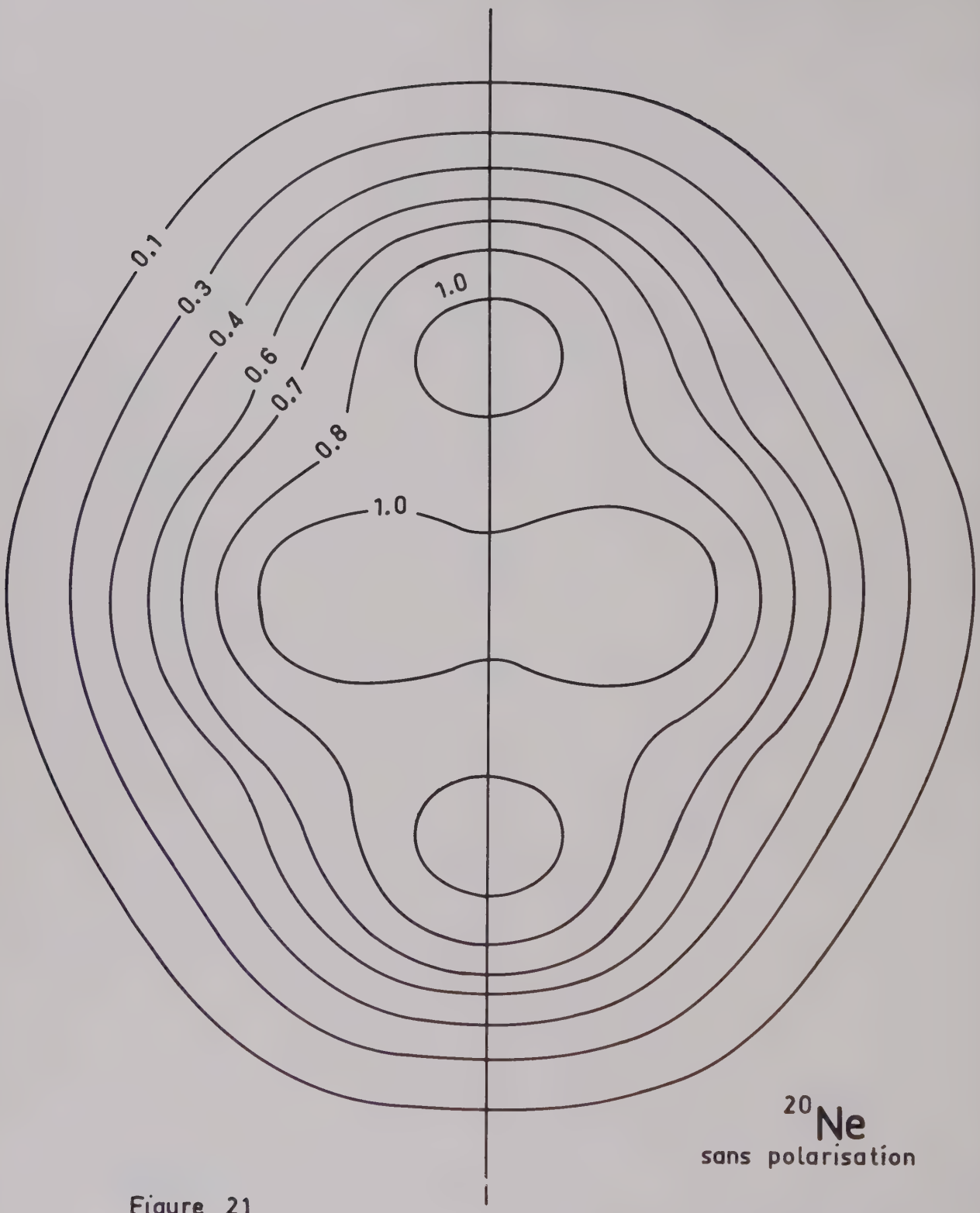


Figure 21

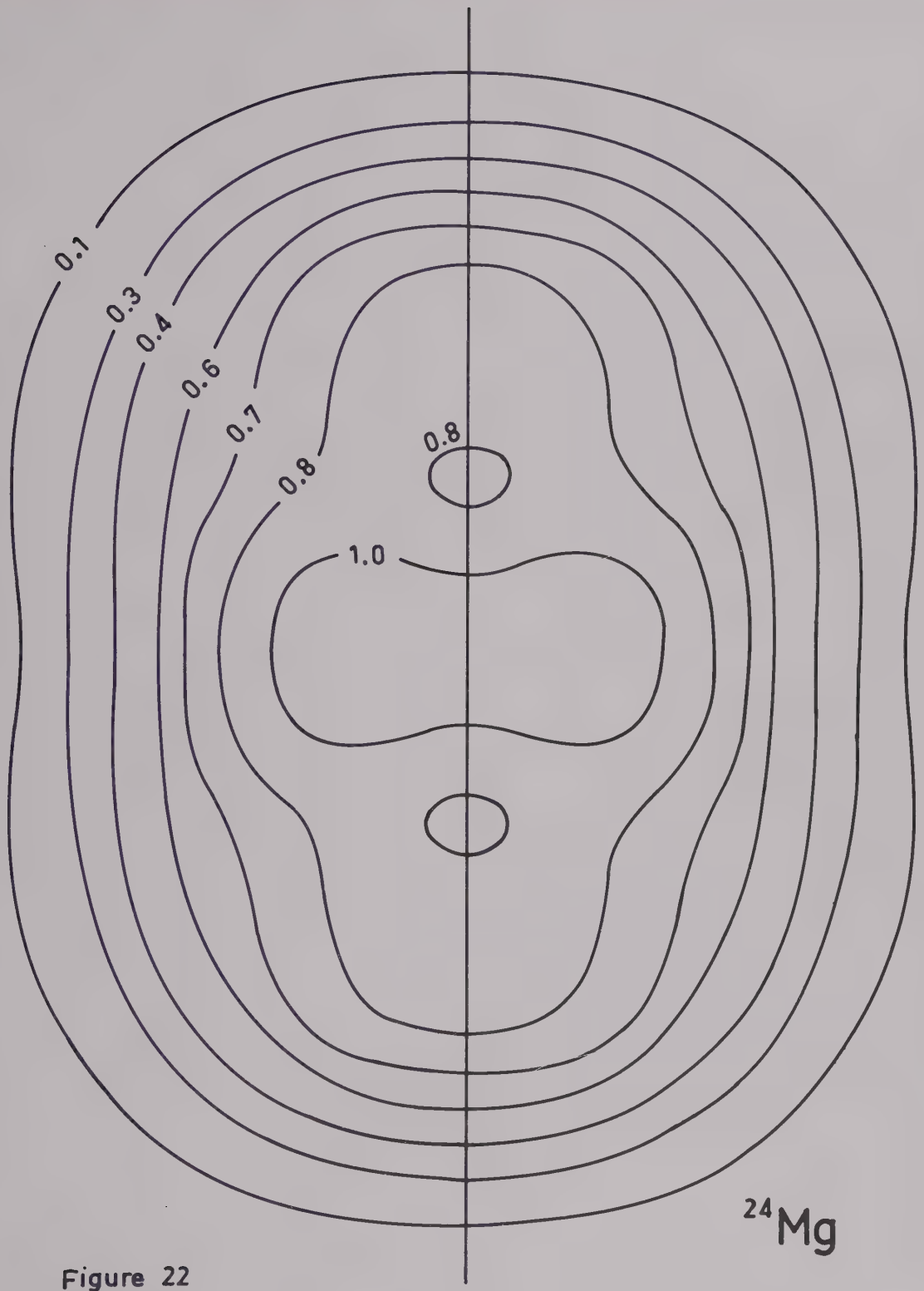


Figure 22

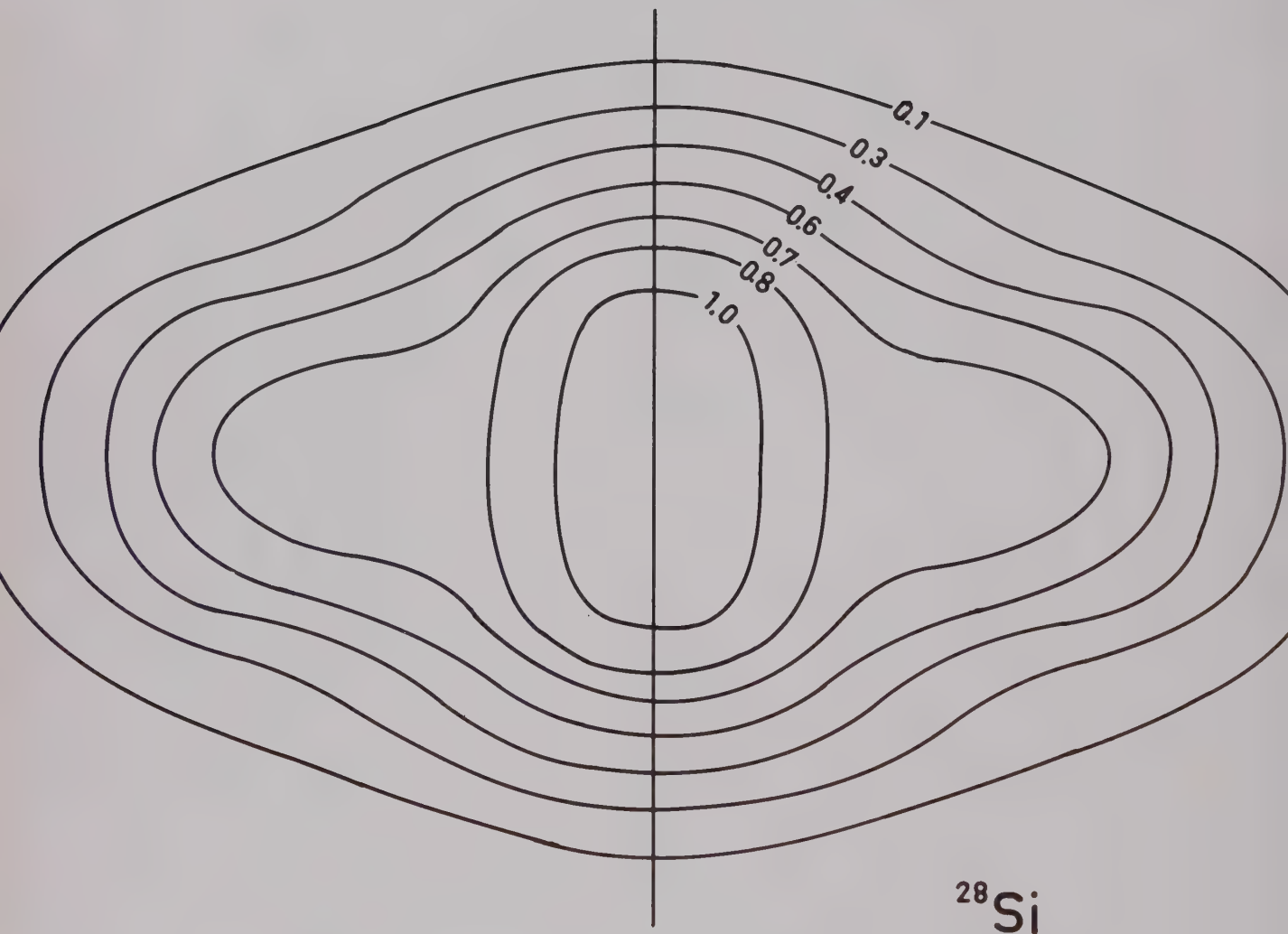


Figure 23

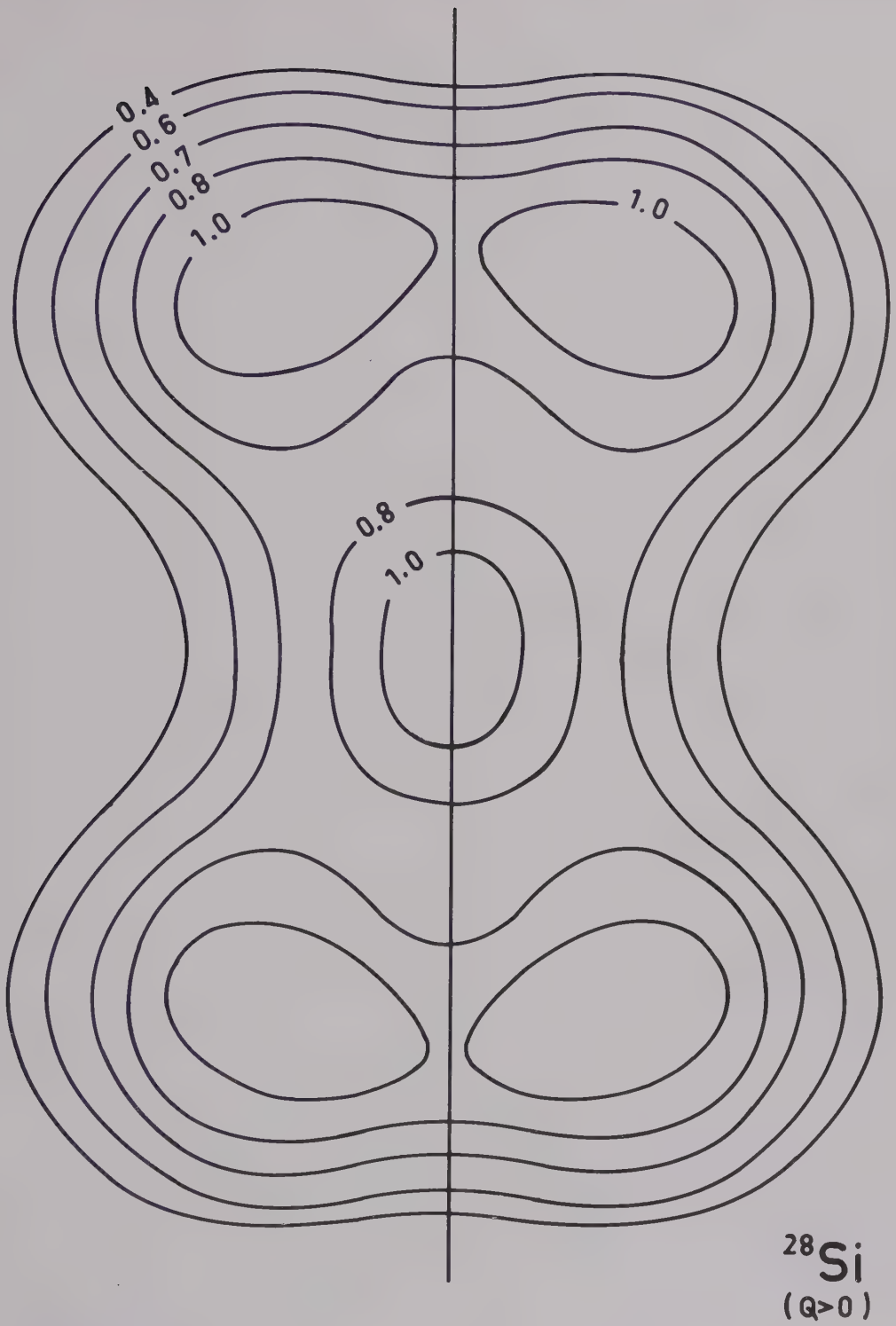


Figure 24

CHAPITRE XIV

CONCLUSION

La théorie de Hartree-Fock est un outil précieux pour étudier les systèmes de neutrons et de protons en interaction dans les couches ouvertes. Nous avons pu rendre compte des énergies de séparation des neutrons et de la grande lacune en énergie dans le spectre de particules indépendantes de ces noyaux. Le rôle des composantes à longue portée monopolaire et quadrupolaire est apparu clairement et nous avons montré l'importance de la non-localité du potentiel moyen pour la lacune en énergie. Nous avons également montré le rôle important de l'interaction spin-orbite qui tend à détruire la stabilité des déformations dans la seconde moitié de la couche 2s-1d . L'étude de la projection du moment cinétique nous a permis de faire une critique de la validité du modèle rotationel adiabatique dans les noyaux légers : le nombre de nucléons dans les couches ouvertes et les moments cinétiques de ces couches ne semblent pas assez grands pour que les variables collectives du modèle adiabatique -tel que l'orientation dans l'espace de l'état déformé- soient bien définies. Il serait utile de faire une étude de toutes les variables collectives afin d'examiner la stabilité des états de Hartree-Fock. Enfin, nous avons fait un calcul microscopique de la polarisation des couches complètes et nous avons obtenu des déformations quadrupolaires en bon accord avec les résultats expérimentaux. Nous avons montré le rôle de l'énergie cinétique dans la polarisation des couches complètes et nous avons trouvé que les configurations de poids maximum dans le schéma (λ,μ) de Elliott étaient aussi celles qui minimisent l'énergie cinétique. Nous avons ainsi mis en évidence la compatibilité entre les modèles d'Elliott et de Mottelson.

Il est certain que la théorie de Hartree-Fock, c'est-à-dire le modèle de particules indépendantes, n'est pas suffisante pour rendre compte de toutes les propriétés spectroscopiques des noyaux légers. Elle est d'abord limitée aux noyaux ayant un nombre égal de neutrons et de protons dans les couches ouvertes. Pour les noyaux ayant un excès de neutrons supérieur à deux, il est vraisemblable que des effets d'appariement seront nécessaires pour expliquer la lacune en énergie des neutrons que la théorie Hartree-Fock prévoit trop petite. Il serait intéressant d'étudier les effets d'appariement même dans les noyaux ayant un nombre égal de neutrons et de protons. Il reste également à expliquer les trop grands moments d'inertie obtenus dans le milieu de la couche 2s-1d ainsi que la multiplicité des formes d'équilibre prévue par la théorie. Le mélange des différentes formes d'équilibre est un phénomène qu'il serait utile d'étudier afin de rendre compte des transitions électromagnétiques. Il semble donc que pour améliorer les fonctions d'onde il faudra sortir du cadre du modèle de particules indépendantes, et un des grands mérites de la théorie de Hartree Fock est de permettre un calcul microscopique assez précis des paramètres de ce modèle pour en montrer les limites.

TABLEAU 1

Noyau	Rayon quadratique moyen	α
^{4}He	1.62	0.756
^{12}C	2.37	0.620
^{16}O	2.64	0.568
^{24}Mg	2.98	0.547
^{28}Si	3.04	0.548
^{32}S	3.19	0.531
^{40}Ca	3.52	0.492

Tableau 1 : Rayons quadratiques moyens de la distribution de charge de divers noyaux obtenus par la diffusion d'électrons [20] et la valeur de la constante de l'oscillateur harmonique $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ (en Fermis) qui donne la valeur expériementale du rayon avec une fonction d'onde où chaque orbite appartient à une couche majeure.

TABLEAU 2

Noyau	α	$\varepsilon_{d_{5/2}}$	$\varepsilon_{s_{1/2}}$	$\varepsilon_{d_{3/2}}$
^{16}O	0.568	-4.14	-3.27	0.93
^{20}Ne	0.559	-4.38	-3.26	0.79
^{24}Mg	0.547	-4.71	-3.26	0.61
^{28}Si	0.548	-4.68	-3.26	0.62
^{32}S	0.531	-5.14	-3.25	0.36
^{36}A	0.496	-6.09	-3.22	-0.19
^{40}Ca	0.492	-6.19	-3.22	-0.25

Tableau 2 : Valeurs de la constante α de l'oscillateur harmonique et des énergies ε_j de la couche 2s-1d utilisées dans les calculs de Hartree-Fock dans une couche majeure avec une force de Rosenfeld. Les valeurs de α pour le ^{20}Ne et l'^{36}A sont extrapolées à partir des valeurs des noyaux voisins données par le tableau 1 .

TABLEAU 3

SOLUTIONS SPHERIQUES

Orbite \ Noyau	^{12}C	^{16}O	^{28}Si	^{32}S	^{36}Ar	^{40}Ca
$1d_{3/2}$	5.12	+ 0.93	- 10.12	- 11.59	- 14.36*	- 15.73*
$2s_{1/2}$	- 1.20	- 3.27	- 8.92	- 17.00*	- 11.16	- 18.20*
$1d_{5/2}$	0.84	- 4.15	- 14.35*	- 16.13*	- 20.26*	- 21.73*
$1p_{1/2}$	- 8.43	-15.67*	- 28.13*	- 29.29*	- 32.23*	- 33.66*
$1p_{3/2}$	-13.25*	-21.83*	- 33.32*	- 34.58*	- 38.39*	- 39.82*
E_{HF}	48.57	0	-114.22	-168.08	-216.25	-274.30

Tableau 3 : Les énergies des orbites de Hartree-Fock des solutions sphériques de divers noyaux. La dernière ligne donne l'énergie de Hartree-Fock par rapport à l'énergie de l' ^{16}O . Les énergies des orbites de l' ^{16}O et du ^{40}Ca sont expérimentales (sauf pour celles des orbites de la couche 1p dans le ^{40}Ca) : elles sont utilisées pour la détermination de l'intensité V_o de la force et des énergies ε_j (chapitre IV). L'astérisque dénote les couches occupées.

TABLEAU 4

SOLUTIONS AYANT LA SYMETRIE AXIALE

	^{12}C	^{20}Ne	^{24}Mg	^{28}Si all.	^{28}Si apl.	^{32}S apl.	^{32}S all.	^{36}Ar
Orbites de la couche 1p	-18.29*	-27.62*	-32.03*	-36.37*	-35.09*	-35.30*	-37.21*	-38.29*
	-14.80*	.9626	-.9480	-.9356	-32.13*	-34.11*	-.9776	-36.32*
	.7343	.2710	.3184	.3530	.8344	.9874	.2107	.9534
	.6789	-23.81*	-26.95*	-29.92*	.5511	.1582	-34.38*	.3019
	- 1.84	-18.69*	-22.29*	-25.08*	-24.07*	-29.03*	-29.66*	-30.54*
	.6789	.2710	.3184	.3530	.5511	.1582	.2107	.3019
	.7343	.9626	.9480	.9356	-.8344	-.9874	.9776	.9534
Orbites de la couche 2s-1d	- 2.71	-14.58*	-16.25*	-19.37*	-18.53*	-17.95*	-19.74*	-20.92*
	- 1.64	-.7576	-.7904	-.7763	-17.98*	-.7536	-.8856	-19.78*
	-.2450	.5273	.5452	.6188	-.5783	-.5904	.4641	.9941
	-.9652	.3847	.2794	.1203	-.7596	.2891	.0203	.1084
	.0914	- 6.58	-11.94*	-17.53*	.2977	-17.61*	-19.91*	-18.80*
	0.13	-.9932	-.9706	-.9531	-14.99*	-16.48*	-.9753	.8054
	.8521	.1167	.2406	.3027	.6935	-.5655	.2209	.5873
	.5234	- 5.19	- 9.81	-14.67*	.7204	.8064	-15.51*	.0801
	3.41	-.6357	-.5436	-.4572	- 8.32	.1729	-.2985	-15.83*
	.9493	-.7298	-.4139	-.4212	.7204	-15.07*	-.5350	-.4393
	-.2196	-.2516	-.7302	-.7833	-.6935	.9081	-.7903	.6822
	.2251	- 5.14	- 7.50	- 9.26	- 8.11	.4187	-14.33*	-.5844
	4.35	- 2.35	- 4.89	- 6.50	.8044	-11.37	-10.23	-14.74*
	.5234	-.1481	.2825	.4340	-.4702	.4187	.2209	.1084
	-.8521	.4351	.7290	.6630	.3630	-.9081	.9753	-.9941
	8.01	-.3881	-.6235	-.6099	- 4.10	-10.03	-10.03	-10.14
	.1972	- 0.25	- 2.99	- 4.70	.1358	.3352	.3559	.3979
	-.1419	.1167	.2406	.3027	-.4494	.0332	.7060	-.4355
	-.9700	.9932	.9706	.9531	-.8830	.9416	-.6123	-.8075
E_{HF}	41.06	-35.78	-72.91	-122.01	-123.00	-168.44	-168.80	-220.48
$\langle J^2 \rangle$	7.24	16.33	18.73	26.74	23.50	16.92	14.85	14.07

Tableau 4 : Les solutions à symétrie axiale.

Les nombres soulignés sont les énergies e_λ des orbites de Hartree-Fock L'énergie de chaque orbite est suivie de ses composantes C_j^λ . Les trois premières orbites ont une parité négative et elles appartiennent à la couche 1p. Les six orbites suivantes ont une parité positive et elles appartiennent à la couche 2s-1d. Les énergies des orbites $m_\lambda = 1/2$ de parité négative sont suivies de leurs composantes sur les états $p_{1/2}^{3/2}$ et $p_{1/2}^{1/2}$. Les orbites $m_\lambda = 3/2$ de parité négative n'ont pas de composante indiquée, car ils sont des états purs $p_{3/2}^{3/2}$. Les orbites $m_\lambda = 1/2$ de parité positive sont suivies de leurs composantes sur les états $d_{1/2}^{5/2}$, $2_{1/2}^{1/2}$ et $d_{1/2}^{3/2}$. Les orbites $m_\lambda = 3/2$ de parité positive sont suivies de leurs composantes sur les états $d_{3/2}^{5/2}$ et $d_{3/2}^{3/2}$. Les orbites $m_\lambda = 5/2$ de parité positive n'ont pas de composante indiquée. Ils sont des états purs $d_{5/2}^{5/2}$. Les deux dernières lignes donnent l'énergie de Hartree-Fock et la valeur moyenne de $\vec{J}^2$ dans l'état déformé de Hartree-Fock. Les astérisques dénotent les orbites occupées.

TABLEAU 5

LES SOLUTIONS ELLIPSOIDALES DU MAGNESIUM 24 ET DU SOUFRE 32

e_λ	$d^{5/2}_{-3/2}$	$d^{5/2}_{1/2}$	$d^{5/2}_{5/2}$	$2s^{1/2}_{1/2}$	$d^{3/2}_{1/2}$	$d^{3/2}_{-3/2}$
Magnesium 24 $\alpha = 0.547$ $d^{5/2} = -4.71$ $s^{1/2} = -3.26$ $d^{3/2} = 0.61$ $E = -76.73$						
-16.89*	-0.2118	-0.7794	0.1213	0.5327	0.1544	-0.1595
-14.48*	0.7553	0.1051	0.0870	0.3343	0.5201	0.1690
- 7.90	0.3945	-0.5034	-0.6553	-0.3544	-0.1644	0.0945
- 6.94	-0.3558	0.2971	-0.7253	0.3311	0.3828	-0.0545
- 4.92	-0.2788	-0.1976	0.1486	-0.5581	0.6951	0.2577
- 2.45	-0.1570	-0.0294	-0.0120	0.2403	-0.2212	0.9315
Soufre 32 $\alpha = 0.531$ $d^{5/2} = -5.14$ $s^{1/2} = -3.24$ $d^{3/2} = 0.35$ $E = -171.84$						
-20.70*	0.0938	-0.1597	0.9382	-0.2869	0.0374	-0.0412
-19.36*	0.5274	-0.5734	-0.3161	-0.5185	0.0086	-0.1555
-17.51*	-0.7117	-0.2047	-0.1184	-0.4973	0.3509	0.2592
-15.14*	-0.0546	0.4208	-0.0477	-0.2478	0.3541	-0.7943
- 9.90	-0.4060	-0.6023	0.0410	0.3799	-0.2393	-0.5188
- 6.50	-0.1969	0.2528	-0.0431	-0.4426	-0.8323	-0.0829

Tableau 5 : Les solutions ellipsoïdales du ^{24}Mg et du ^{32}S . Les lignes titre donnent la valeur de la constante de l'oscillateur harmonique, les énergies ε_j utilisées et l'énergie de Hartree-Fock trouvée. La première colonne donne l'énergie e_λ de l'orbite et les colonnes suivantes donnent les composantes sur les états indiqués de la couche 2s-1d .

TABLEAU 6

Noyau	A	E(A)	E(A) - E(A-1) Niveau de Fermi	Lacune en énergie	$\frac{E(A) - E(16)}{A - 16}$
^{12}C	12	- 101.38	- 18.72	13.77	10.37
^{16}O	16	- 142.88	- 15.67	11.53	0
^{20}Ne	20	- 181.98	- 16.87	10.11	- 9.77
^{24}Mg	24	- 228.71	- 16.54	9.21	- 10.73
^{28}Si	28	- 277.26	- 17.17	8.69	- 11.20
^{32}S	32	- 323.23	- 15.08	6.43	- 11.27
^{36}A	36	- 369.42	- 15.27	6.48	- 11.33
^{40}Ca	40	- 416.97	- 15.63	7.27	- 11.42

Tableau 6 : Les valeurs expérimentales des énergies de liaison et des énergies de séparation de neutron. On a soustrait à l'énergie de liaison l'énergie coulombienne qu'on a supposée être de la forme $E_c = \alpha \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}}$. La valeur de α a été obtenue par la différence entre les énergies de liaison des noyaux mirroirs ayant $A-1$ nucléons. $E(A) - E(A-1)$ est l'énergie de séparation de neutron du noyau pair-pair A . La lacune en énergie est $G = E(A+1) - E(A) - [E(A) - E(A-1)]$. La dernière colonne donne l'énergie de liaison par nucléon dans la couche 2s-1d relative à l'énergie de liaison de l' ^{16}O .

TABLEAU 7

Noyau	Forme	Niveau de Fermi	Lacune en énergie	$E_{HF}/(A-16)$
^{12}C	aplatie	- 14.80	12.09	10.26
^{16}O	sphérique	- 15.67*	11.53*	0
^{20}Ne	allongée	- 14.58	8.00	- 8.84
^{24}Mg	ellipsoïdale	- 14.48	6.58	- 9.59
^{28}Si	allongée	- 14.67	5.41	- 10.17
^{28}Si	aplatie	- 14.99	6.67	- 10.25
^{32}S	ellipsoïdale	- 15.14	5.24	- 10.74
^{36}A	aplatie	- 14.74	4.60	- 11.02
^{40}Ca	sphérique	- 15.73*	7.27*	- 11.42*

Tableau 7 : Le niveau de Fermi (l'énergie de l'orbite occupée la plus haute), la lacune en énergie entre le niveau de Fermi et l'orbite vide la plus basse et l'énergie de Hartree-Fock divisée par le nombre de nucléons dans la couche 2s-1d obtenus par les calculs de Hartree-Fock dans une couche majeure avec une force de Rosenfeld. Les nombres avec une astérisque sont des valeurs expérimentales utilisées pour déterminer l'intensité de la force V_o et les énergies ε_j (chapitre IV).

TABLEAU 8

(jm) Orbite $(n_x\ n_y\ n_z)$	$d^{5/2}_{-3/2}$	$d^{5/2}_{1/2}$	$d^{5/2}_{5/2}$	$s^{1/2}_{1/2}$	$d^{3/2}_{1/2}$	$d^{3/2}_{-3/2}$
(002) ↑	0	$\sqrt{\frac{2}{5}}$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$-\sqrt{\frac{4}{15}}$	0
1(011) ↓	$\sqrt{\frac{2}{5}}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}$	0	0	$\sqrt{\frac{3}{10}}$	$\frac{1}{\sqrt{10}}$
-(101) ↓	$-\sqrt{\frac{2}{5}}$	$\sqrt{\frac{1}{5}}$	0	0	$\sqrt{\frac{3}{10}}$	$-\frac{1}{\sqrt{10}}$
-1(110) ↑	$-\frac{1}{\sqrt{10}}$	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	0	$\sqrt{\frac{2}{5}}$
(020) ↑	$-\frac{1}{\sqrt{20}}$	$-\frac{1}{\sqrt{10}}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{15}}$	$\frac{1}{\sqrt{5}}$
(200) ↑	$\frac{1}{\sqrt{20}}$	$-\frac{1}{\sqrt{10}}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{15}}$	$-\frac{1}{\sqrt{5}}$

$$(002) = -\frac{1}{\sqrt{3}}\ s_o + \sqrt{\frac{2}{3}}\ d_o$$

$$(011) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\ (d_1 + d_{-1})$$

$$(101) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\ (d_1 - d_{-1})$$

$$(110) = \frac{1}{\sqrt{2}}\ (d_2 - d_{-2})$$

$$(020) = -\frac{1}{\sqrt{3}}\ s_o - \frac{1}{\sqrt{6}}\ d_o - \frac{1}{2}\ (d_2 + d_{-2})$$

$$(200) = -\frac{1}{\sqrt{3}}\ s_o - \frac{1}{\sqrt{6}}\ d_o + \frac{1}{2}\ (d_2 + d_{-2})$$

Tableau 8 : Relation entre diverses représentations d'états de la couche 2s-1d d'un oscillateur harmonique isotrope[30]. Le tableau donne la relation entre les états (n_x, n_y, n_z) et les états φ_{jm}. Sous le tableau les états (n_x, n_y, n_z) sont exprimés dans la base $\varphi_{\ell m}$. La notation spectroscopique d_1 signifie l'état avec $\ell = 2$ et $m = 1$. Les flèches ↑ et ↓ dénotent les composantes + 1/2 et - 1/2 du spin sur l'axe z.

TABLEAU 9

Noyau	Orbites remplies $n_x\ n_y\ n_z$	(λ,μ)	$G = \lambda^2+\mu^2+\lambda\mu + 3(\lambda+\mu)$	$N_x\ N_y\ N_z$	E_{HF}	Lacune en énergie
^{20}Ne	002	(8,0)	88	539/8	- 35.78	8.00
	110	(0,4)	28	567/8	- 31.44	4.89
^{24}Mg	002 011	(8,4)	148	140	- 76.73	6.58
	002 020	(0,8)	88	144	- 75.14	6.15
	002 110	(4,0)	28	150	- 72.52	5.67
	101 011	(4,0)	28	150	- 71.24	4.47
^{28}Si	200 020 110	(0,12)	180	2025/8	-123.00	6.67
	002 011 101	(12,0)	180	2057/8	-122.01	5.41
	002 101 110	(8,4)	148	2145/8	-118.46	5.07
	200 020 011	(4,8)	148	2145/8	-119.16	5.15
	002 020 200	(0,0)	0	2197/8	-118.20	4.79
	110 101 011	(0,0)	0	2197/8	-117.44	6.27

TABLEAU 9 (Suite)

Noyau	Orbites remplies $n_x\ n_y\ n_z$	(λ,μ)	$G = \lambda^2+\mu^2+\lambda\mu + 3(\lambda+\mu)$	$N_x\ N_y\ N_z$	E_{HF}	Lacune en énergie
^{32}S	200 020 101 110	(4,8)	148	432	-171.84	5.24
	200 110 101 011	(8,0)	88	441	-170.64	5.63
	200 020 002 110	(0,4)	28	448	-169.24	3.91
	200 020 011 101	(0,4)	28	448	-170.57	6.58
^{36}Ar	020 200 110 101 011	(0,8)	88	5415/8	-220.48	4.6
	002 020 200 101 011	(4,0)	28	5491/8	-218.24	1.84

Tableau 9 : Diverses solutions des équations de Hartree-Fock des noyaux pair - pairs $N = Z$. La deuxième colonne donne le remplissage initial des orbites à partir duquel le processus itératif a été commencé. Quatre nucléons étaient placés dans chaque orbite (n_x, n_y, n_z) indiquée. Les troisième et quatrième colonnes donnent les valeurs de (λ,μ)et les poids correspondants G . La cinquième colonne donne le produit des nombres N_x, N_y, N_z définis dans l'équation (98) et obtenus en sommant sur les orbites des couches 1s, 1p et 2s-1d. Les deux dernières colonnes donnent l'énergie de Hartree-Fock et la lacune en énergie de la solution.

TABLEAU 10

	λ	e_λ	$d^{5/2}$	$s^{1/2}$	$d^{3/2}$	E_{HF}
	p	- 16.07	- .7594	.5408	.3617	- 42.39
	n	- 14.00	- .7666	.5336	.3572	
K = 1/2	- p	- 15.11	.7550	- .5451	.3644	
	- n	- 15.23	.7441	- .5468	.3838	
K = 3/2	n	- 6.63	- .9925		.1233	
	p	- 15.29	- .7888	.4671	.3995	- 40.98
	n	- 14.14	- .7891	.4842	.3781	
K = 1/2	- p	- 14.68	.7976	- .4634	.3862	
	- n	- 14.84	.7768	- .4787	.4092	
K = 5/2	n	- 5.28	1.0000			
	p	- 15.45	- .7075	.6125	.3525	- 41.08
	n	- 14.52	- .7313	.5829	.3540	
K = 1/2	- p	- 15.32	.7138	- .6057	.3516	
	- n	- 14.58	.7121	- .5982	.3675	
K = 1/2'	n	- 5.43	- .6719	- .7050	- .2272	

			NEON 20			E(non- perturbée.)
K = 1/2	p	- 14.58	- .7576	.5273	.3847	
K = 3/2	p	- 6.58	- .9932		.1167	- 42.36
K = 5/2	p	- 5.14	1.0000			- 40.92
K = 1/2'	p	- 5.19	- .6357	- .7298	- .2516	- 40.97

Tableau 10 : La polarisation du coeur de ^{20}Ne par le neutron impair du ^{21}Ne. Les orbites de trois solutions du ^{21}Ne sont données. Le neutron impair occupe les orbites $K = 3/2$, $5/2$ et $1/2$ successivement. Les fonctions d'onde et les énergies de toutes lesorbites occupées sont données pour chacune des trois solutions. Les orbites sont données par leur composantes sur les états $d^{5/2}$, $2s^{1/2}$ et $d^{3/2}$ (colonnes 4 et 6). La dernière colonne donne l'énergie de Hartree-Fock du ^{21}Ne. Les orbites correspondantes du ^{20}Ne sont données à titre de comparaison dans le dernier tableau. L'énergie non perturbée est l'énergie qu'aurait le ^{21}Ne s'il était composé des mêmes orbites que le ^{20}Ne. Cette énergie est égale à $E = E_o + e_\lambda$ où E_o est l'énergie du ^{20}Ne et e_λ l'énergie, dans le champ du ^{20}Ne de l'orbite par le nucléon impair.

TABLEAU 11

NOYAU	K	J	COEUR PAIR-PAIR	CALC.	EXP.	SCHMIDT
B^{11}	$3/2^-$	$3/2^-$	C^{12}	2.57	2.69	3.79
C^{13}	$1/2^-$	$1/2^-$		0.86	0.72	0.64
F^{19}	$1/2^+$	$1/2^+$	Ne^{20}	2.82	2.63	2.79
	$1/2^+$	$5/2^+$		3.86	3.5 ± 0.5	4.79
Ne^{21}	$3/2^+$	$3/2^+$		-0.582	-0.66	1.14
Na^{23}	$3/2^+$	$3/2^+$	Mg^{24}	2.44	2.22	0.12
Mg^{25}	$5/2^+$	$5/2^+$		-1.01	-0.85	-1.91
Al^{27}	$5/2^+$	$5/2^+$	Si^{28}	3.78	3.64	4.79
	$1/2^+$	$5/2^+$	Si^{28} aplati	3.81		
Si^{29}	$1/2^+$	$1/2^+$		-0.47	-0.56	-1.91
			Si^{28} allongé	-1.689		
S^{33}	$3/2^+$	$3/2^+$	S^{32} aplati	0.05	0.64	1.14
			S^{32} allongé	1.317		
Cl^{35}	$3/2^+$	$3/2^+$	Ar^{36}	0.63	0.82	0.12

Tableau 11 : Les moments magnétiques des noyaux impairs[31] calculés avec les solutions à symétrie axiale du tableau 4. Les états intrinsèques sont dénotés par K, la projection de J_z sur l'axe de symétrie. La troisième colonne donne le moment cinétique de l'état. La quatrième colonne indique la nature du coeur pair-pair. Les trois dernières lignes donnent les moments magnétiques calculés, expérimentaux et calculés par la formule de Schmidt.

TABLEAU 12

J	^{12}C	^{20}Ne	^{28}Si	^{36}Ar
0	0.230	0.109	0.079	0.132
2	0.582	0.398	0.313	0.440
4	0.188	0.336	0.326	0.314
6	0	0.134	0.194	0.100
8	0	0.022	0.071	0.013

Tableau 12 : La distribution N_{JK} des moments cinétiques J dans les états déformés du ^{12}C, ^{20}Ne, ^{28}Si (aplati) et ^{36}Ar donnés par le tableau 4. Les distributions sont données jusqu'à $J = 8$ qui est la valeur maxima de la bande du ^{20}Ne et de l'^{36}Ar. $J = 4$ est la valeur maxima de la bande du ^{12}C .

TABLEAU 13

NOYAU	UNE COUCHE MAJEURE	MELANGE DE COUCHES MAJEURES
C^{12}	-0.3	-0.47
Ne^{20}	0.31	0.59
Mg^{24}	0.30	0.63
Si^{28} APLATI	-0.30	-0.49
Si^{28} ALLONGE	0.30	0.75
S^{32} APLATI	-0.08	-0.13
S^{32} ALLONGE	0.17	0.35
Ar^{36}	-0.15	-0.24

Tableau 13 : L'effet de la polarisation des couches complètes sur la déformation quadrupolaire dans divers noyaux. Les colonnes 2 et 3 donnent la déformation des solutions axiales obtenues avec un calcul de Hartree-Fock dans une couche majeure et avec mélange de couches majeures respectivement.

TABLEAU 14

NOYAU		CONFIGURATIONS	$\langle r^2 \rangle$	$\frac{\langle Q \rangle}{\langle r^2 \rangle}$	E	$\frac{a}{b}$	R
O^{16}		UNE COUCHE MAJEURE	35.9	0	-109.2	1.0	7.75
		MELANGE DE COUCHES	35.5	0	-109.4	1.0	7.70
Ne^{20}		UNE COUCHE MAJEURE	56.4	0.31	-126	1.16	9.35
		MELANGE DE COUCHES	61.6	0.59	-139	1.31	9.30
Si^{28}	APLATI	UNE COUCHE MAJEURE	90.2	-0.30	-206	0.85	12.45
		MELANGE DE COUCHES	99.8	-0.49	-226	0.74	13.00
ALLONGE		MELANGE DE COUCHES	124.7	0.75	-232	1.41	12.8

Tableau 14 : Comparaison des états déformés avec une ellipsoïde de révolution. Les colonnes 3 et 4 donnent les moments monopolaires et la déformation quadrupolaire de diverses solutions indiquées dans la deuxième colonne. La cinquième colonne donne l'énergie de Hartree-Fock. Les deux dernières colonnes donnent le rapport des axes ainsi que le rayon équivalent $R = \sqrt[3]{a\,b^2}$ de l'ellipsoïde qui a les mêmes moments monopolaire et quadrupolaire que la solution de Hartree-Fock. Les longueurs sont exprimées en Fermis et les énergies en MeV.

TABLEAU 15

NOYAU	K	J	COEUR PAIR-PAIR	UNE COUCHE MAJEURE	MELANGE DE COUCHES	EXP.
B^{11}	$3/2^-$	$3/2^-$	C^{12}	-1.52	-2.54	±3.1
Ne^{21}	$3/2^+$	$3/2^+$	Ne^{20}	4.83	9.65	9.0
Na^{23}	$3/2^+$	$3/2^+$	Mg^{24}	5.70	12.0	11
Mg^{25}	$5/2^+$	$5/2^+$		11.2	23.2	22
Al^{27}	$5/2^+$	$5/2^+$	Si^{28} APLATI	-11.3	-20	15
	$1/2^+$	$5/2^+$		9.15	16.1	
S^{33}	$3/2^+$	$3/2^+$	S^{32} APLATI	-2.52	-4.32	-5.5
	$3/2^+$	$3/2^+$	ALLONGE	7.6	11.8	
Cl^{35}	$3/2^+$	$3/2^+$	Ar^{36}	-5.84	-9.8	-7.9

Tableau 15 : Moments quadrupolaires des noyaux pair-impairs. Les quatre premières colonnes ont la même signification que celles du tableau 11. Les colonnes 5 et 6 donnent les moments quadrupolaires obtenus avec les déformations des états de Hartree-Fock dans une couche majeure et avec mélange de couches majeures. La dernière colonne donne la valeur expérimentale. Les moments quadrupolaires sont exprimés en unités de $fm^2 = 0{,}01$ barn

TABLEAU 16

CALCUL DE HARTREE-FOCK

	Une couche majeure		Mélange de couches	
Couche	$\langle r^2 \rangle$	Q_o	$\langle r^2 \rangle$	Q_o
1 s	6.76	0	6.66	1.42
1 p	33.78	0	35.10	9.41
2s - 1d	15.78	17.23	19.82	26.29
TOTAL	56.32	17.23	61.58	37.12

MODELE DE MOTTELSON

	Oscillateur Isotrope		Oscillateur déformé	
Couche	$\langle r^2 \rangle$	Q_o	$\langle r^2 \rangle$	Q_o
1 s	6.78	0	7.14	2.28
1 p	33.81	0	35.69	11.42
2s - 1d	15.78	18.09	17.70	27.20
TOTAL	56.37	18.09	60.52	41.10

Tableau 16 : Une comparaison entre les fonctions d'onde de Hartree-Fock et celles du modèle de Mottelson poiur le ^{20}Ne. Les contributions aux moments monopolaire et quadrupolaire des orbites appartenant à chaque couche majeure sont indiquées.

APPENDICE A

LES FONCTIONS DE BASE

Fonctions $\varphi_{n\ell m}(\vec{r})$ de l'oscillateur harmonique isotrope

Nous utilisons les fonctions d'onde d'un oscillateur harmonique isotrope :

$$h\,\varphi_{n\ell m}(\vec{r}) = (2n+\ell-\tfrac{1}{2})\,\hbar\omega\,\varphi_{n\ell m}(\vec{r})$$

où $n = 1,2,3,\ldots$ et $\ell = 0,1,2,\ldots$

$$h = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\omega^2 r^2 \quad .$$

Les fonctions d'onde $\varphi_{n\ell m}(\vec{r})$ s'écrivent[2] :

$$\varphi_{n\ell m}(\vec{r}) = u_{n\ell}(r)\,Y_{\ell m}(\Omega) \quad ,$$

où Ω représente les angles (θ,φ) qui définissent la direction du vecteur $\vec{r}$. Nous utilisons les harmoniques sphériques définies par Messiah[2] :

$$Y^*_{\ell m}(\Omega) = (-)^m\,Y_{\ell -m}(\Omega) \qquad \int d\Omega\,Y^*_{\ell m}(\Omega)\,Y_{\ell' m'}(\Omega) = \delta_{mm'}\,\delta_{\ell\ell'} \quad .$$

Les fonctions radiales $u_{n\ell}(r)$ sont définies ainsi :

$$u_{n\ell}(r) = \alpha^{\ell+3/2}\,r^{\ell}\,e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}}\,L^{\ell+1/2}_{n-1}(\alpha^2 r^2)\,\pi^{-1/4}\sqrt{\frac{2^{n+\ell+1}(n-1)!}{(2n+2\ell-1)!!}}$$

où $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ est la constante de l'oscillateur harmonique. $L^a_b(x)$ est un polynôme de Laguerre :

$$L^a_b(x) = \sum_{m=o}^{b} \frac{(b+a)!}{(b-m)!(a+m)!}\,\frac{(-x)^m}{m!} \quad .$$

En particulier :

$$L_0^{\ell+1/2}(\alpha^2 r^2) = 1 \qquad L_1^{\ell+1/2}(\alpha^2 r^2) = \ell+3/2 - \alpha^2 r^2 \ .$$

Les fonctions radiales utilisées sont explicitement :

$$u_{1s}(r) = \frac{2\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \ e^{-(\alpha r)^2/2}$$

$$u_{1p}(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \ \sqrt{\frac{8}{3}}\,(\alpha r)\ e^{-(\alpha r)^2/2}$$

$$u_{1d}(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \ \sqrt{\frac{2^4}{3.5}}\ (\alpha r)^2\ e^{-(\alpha r)^2/2}$$

$$u_{2s}(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \ \sqrt{\frac{8}{3}}\ e^{-(\alpha r)^2/2}\left[\frac{3}{2} - (\alpha r)^2\right]$$

$$u_{1f}(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \ \sqrt{\frac{2^5}{3.5.7}}\ (\alpha r)^3\ e^{-(\alpha r)^2/2}$$

$$u_{2p}(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \ \sqrt{\frac{2^4}{3.5}}\ (\alpha r)\ e^{-(\alpha r)^2/2}\left[\frac{5}{2} - (\alpha r)^2\right]$$

$$u_{1g}(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \ \sqrt{\frac{2^6}{3.5.7.9}}\ (\alpha r)^4\ e^{-(\alpha r)^2/2}$$

$$u_{2d}(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \ \sqrt{\frac{2^5}{3.5.7}}\ (\alpha r)^2\ e^{-(\alpha r)^2/2}\left[\frac{7}{2} - (\alpha r)^2\right]$$

$$u_{3s}(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} \ \sqrt{\frac{2^5}{3.5}}\ e^{-(\alpha r)^2/2}\left\{\frac{15}{8} - \frac{5}{2}(\alpha r)^2 + \frac{(\alpha r)^4}{2}\right\} .$$

On désigne par s,p,d,f,g... les valeurs $\ell = 0,1,2,3,4,\ldots$.

Lorsque les énergies sont exprimées en MeV et les longueurs en Fermi (10^{-13} cm) l'énergie $\hbar\omega$ d'un quantum d'excitation de l'oscillateur est donné en fonction de $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ par la relation :

$$\boxed{\hbar\omega = 41.54\ \alpha^2}$$

Eléments de matrice de r^2 entre états de même parité

Les éléments de matrice de r^2 sont :

$$\langle n_1 \ell_1 | r^2 | n_2 \ell_2 \rangle = \int_0^\infty r^2 dr\ u_{n_1 \ell_1}(r)\ r^2\ u_{n_2 \ell_2}(r) \quad .$$

On a :

$n_1 = n_2 \qquad \ell_1 = \ell_2 \qquad \langle n\ell | r^2 | n\ell \rangle = \frac{1}{\alpha^2} \left\{ 2n+\ell-1/2 \right\}$

$n_1 = n_2+1 \qquad \ell_1 = \ell_2-2 \qquad \langle n+1,\ell-2 | r^2 | n\ell \rangle = -\frac{2}{\alpha^2} \sqrt{n(n+\ell-1/2)}$

$n_1 = n_2-1 \qquad \ell_1 = \ell_2 \qquad \langle n-1,\ell | r^2 | n\ell \rangle = -\frac{1}{\alpha^2} \sqrt{(n-1)(n+\ell-1/2)}$

$n_1 = n_2 \qquad \ell_1 = \ell_2-2 \qquad \langle n,\ell-2 | r^2 | n\ell \rangle = +\frac{1}{\alpha^2} \sqrt{(n+\ell-1/2)(n+\ell-3/2)}$

$n_1 = n_2-2 \qquad \ell_1 = \ell_2+2 \qquad \langle n-2,\ell+1 | r^2 | n\ell \rangle = +\frac{1}{\alpha^2} \sqrt{(n-1)(n-2)} \quad .$

Eléments de matrice de r^{λ}

Référence : Morse et Feshbach, Methods of Theoretical Physics, Mc Graw-Hill (1953) p.785 (voir aussi la référence 4) :

$$\langle n'\ell'|r^{\lambda}|n\ell\rangle = (-)^{n+n'}\left[\frac{\Gamma(n)\ \Gamma(n')}{\Gamma(n+t-\nu)\ \Gamma(n'+t-\nu')}\right]^{1/2} \nu!\ \nu'!\ \alpha^{-\lambda}$$

$$\sum_{\sigma} \frac{\Gamma(t+\sigma+1)}{\sigma!(n-\sigma-1)!(n'-\sigma-1)!(\sigma+\nu-n+1)!(\sigma+\nu'-n'+1)!} ,$$

où :

$$\nu = \frac{1}{2}(\ell'-\ell+\lambda)$$

$$\nu' = \frac{1}{2}(\ell-\ell'+\lambda)$$

$$t = \frac{1}{2}(\ell+\ell'+\lambda+1) \quad .$$

La somme σ est limitée par les inégalités

$$\mathrm{Max}(n-\nu-1,\ n'-\nu'-1) \leq \sigma \leq \mathrm{Min}(n-1,\ n'-1)$$

l'élément de matrice est nul si ces inégalités ne peuvent pas être satisfaites. En particulier certains éléments de matrice utiles de $\langle n_1\ell_1|(\alpha r)^3|n_2\ell_2\rangle$ sont :

$n_1\ell_1$ \ $n_2\ell_2$	1s	1d	2s	1g	2d	3s
1p	$\frac{5}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}$	$\frac{7}{2}\sqrt{\frac{5}{2}}$	-5	$\frac{3}{2}\sqrt{\frac{35}{2}}$	$-\frac{\sqrt{35}}{2}$	$\sqrt{5}$
1f	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{105}{2}}$	$\frac{9}{2}\sqrt{\frac{7}{2}}$	$-\frac{3\sqrt{35}}{2}$	$\frac{33}{2\sqrt{2}}$	-9	$3\sqrt{7}$
2p	$-\frac{\sqrt{15}}{2}$	-7	$\frac{11}{2}\sqrt{\frac{5}{2}}$	$-\frac{9\sqrt{7}}{2}$	$\frac{13}{2}\sqrt{\frac{7}{2}}$	$-8\sqrt{2}$

Fonctions de base $\varphi_{n\ell jm\tau}$

Soit $\chi_{1/2}$ et $\chi_{-1/2}$ les spineurs $\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ et $\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ respectivement. La fonction de base $\varphi_{n\ell jm\tau}$ est définie par l'équation :

$$\varphi_{n\ell jm\tau} = \sum_{m_\ell \sigma} \begin{bmatrix} \ell & 1/2 & j \\ m_\ell & \sigma & m \end{bmatrix} \varphi_{n\ell m_\ell}(\vec{r})\ \chi_\sigma\ \chi_\tau\ .$$

Le moment cinétique orbital ℓ est couplé au spin $1/2$ pour donner un moment cinétique total j .

Les coefficients de Clebsch-Gordan $\begin{bmatrix} \ell & 1/2 & j \\ m_\ell & \sigma & m \end{bmatrix}$ non nuls sont donnés dans le tableau suivant :

	$\sigma = 1/2$	$\sigma = -1/2$
$j=\ell+1/2$	$\sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{2\ell+1}}$	$\sqrt{\frac{\ell-m+1/2}{2\ell+1}}$
$j=\ell-1/2$	$-\sqrt{\frac{\ell-m+1/2}{2\ell+1}}$	$\sqrt{\frac{\ell+m+1/2}{2\ell+1}}$

$j=\ell\pm i/2$

$m=m_\ell+\sigma$

Il existe une expression simple pour l'élément de matrice d'un opérateur $f(r)\ Y_{LM}(\Omega)$ dans la base $\varphi_{n\ell jm\tau}$

$$\langle n_1 \ell_1 j_1 m_1 \tau_1 |\ f(r)\ Y_{LM}(\Omega) | n_2 \ell_2 j_2 m_2 \tau_2 \rangle =$$

$$\delta_{\tau_1 \tau_2} \langle n_1 \ell_1 | f(r) | n_2 \ell_2 \rangle (-)^{j_1 - m_1} \begin{pmatrix} j_1 & L & j_2 \\ -m_1 & M & m_2 \end{pmatrix} (-)^{L+j_2-1/2} \begin{pmatrix} j_1 & L & j_2 \\ -\frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\sqrt{\frac{(2j_1+1)(2j_2+1)(2L+1)}{4\pi}} \quad \frac{1}{2} \left\{ 1 + (-)^{\ell_1+\ell_2+L} \right\}$$

où $\langle n_1 \ell_1 | f(r) | n_2 \ell_2 \rangle = \int_0^\infty r^2 \, dr \, u_{n_1 \ell_1}(r) \, f(r) \, u_{n_2 \ell_2}(r)$,

et $\begin{pmatrix} j_1 & L & j_2 \\ -m_1 & M & m_2 \end{pmatrix}$ est un 3-j de Wigner, défini au paragraphe suivant. (Voir A. de Shalit et I. Talmi, Nuclear Shell Theory, Academic Press, New-York and London 1963 et noter que leur base est $\varphi_{nj\ell m}$ qui diffère de la nôtre par la phase $(-)^{\ell+1/2-j}$).

Coefficients de Clebsch-Gordan et les 3-j de Wigner

Nous utilisons le symbole $\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix}$ pour désigner le coefficient de Clebsch-Gordan simple $\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} = \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$

défini dans l'équation C.11 de l'appendice C de la référence 2. (A. Messiah).

Nous utilisons le symbole

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} = \frac{(-)^{j_1 - j_2 + M}}{\sqrt{2J+1}} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix}$$

pour désigner le coefficient 3-j de Wigner défini dans l'équation C.12 de la référence 2 .

APPENDICE B

ÉLÉMENTS DE MATRICE D'UNE INTÉRACTION CENTRALE

Nous allons calculer les éléments de matrice de l'interaction :

$$v(12) = v(r_{12}) \left\{ \beta + \gamma \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + \delta \vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2 + \epsilon \, (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)(\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2) \right\} \quad . \tag{B1}$$

Considérons la partie radiale $v(r_{12})$ qui est indépendante des variables de spin et d'isospin. On développe la partie radiale $v(r_{12})$ en multipoles :

$$v(r_{12}) \equiv v(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \sum_{k=o}^{\infty} v_k(r_1, r_2) \, P_k(\cos\theta_{12})$$

$$= \sum_{k=o}^{\infty} \frac{4\pi}{2k+1} \sum_{q=-k}^{+k} v_k(r_1, r_2) \, Y_q^{k*}(\Omega_1) \, Y_q^k(\Omega_2) \quad . \tag{B2}$$

Dans le cas particulier où $v(r_{12})$ est une force gaussienne :

$$v(r_{12}) = e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2/\mu^2} \quad , \tag{B3}$$

on montre que

$$v_k(r_1, r_2) = (-i)^k \, (2k+1) \, e^{-(r_1^2 + r_2^2)/\mu^2} \, j_k\left(\frac{2ir_1 r_2}{\mu^2} \right) \quad , \tag{B4}$$

(voir Handbook of Mathematical Functions de M. Abramowitz et I. Stegun, National Bureau of Standards, Mathematical Series 55, Washington D.C., 1965, en particulier l'équation 10.1.14).

$j_k(z)$ est une fonction de Bessel sphérique. On appelle $v_k(r_1,r_2)$ le multipole d'ordre k de l'interaction ou encore sa composante 2^k polaire. On peut aussi l'exprimer à l'aide des fonctions de Bessel sphériques modifiées :

$$v_k(r_1,r_2) = (2k+1)\, e^{-(r_1^2+r_2^2)/\mu^2} \sqrt{\frac{\pi}{2z}}\; I_{k+1/2}(Z) \;, \qquad \text{(B5)}$$

où $Z = \dfrac{2r_1 r_2}{\mu^2}$ et $I_{k+1/2}(Z)$ est donné par la formule de Rayleigh (Abramowitz, Equ. 10.2.24)

$$\sqrt{\frac{\pi}{2Z}}\; I_{k+1/2}(Z) = Z^k \left(\frac{1}{Z}\frac{d}{dZ} \right)^k \frac{\mathrm{Sinh}Z}{Z} \;. \qquad \text{(B6)}$$

Les développements multipolaires d'une force de Yukawa, et d'une force coulombienne sont donnés par les équations B100 et B99 de la référence 2.

Considérons les états à deux particules non-antisymétrisés et couplés à un moment cinétique total (L,M) :

$$|n_1\ell_1, n_2\ell_2, LM) \equiv \sum_{m_1 m_2} \begin{bmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} \varphi_{n_1\ell_1 m_1}(\vec{r}_1)\, \varphi_{n_2\ell_2 m_2}(\vec{r}_2) \;. \qquad \text{(B7)}$$

Nous utilisons la notation $|\ )$ et $(|v|)$ pour les états et les éléments de matrice non-antisymétrisés et la notation $|\ \rangle$ et $\langle|v|\rangle$ pour les états et les éléments de matrice antisymétrisés. L'élément de matrice de la partie radiale $v(r_{12})$ entre des états couplés B7 est :

$$(n_1\ell_1, n_2\ell_2, LM|v(r)|n_3\ell_3, n_4\ell_4, L'M') = \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ m_3 m_4}} \begin{bmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell_3 & \ell_4 & L' \\ m_3 & m_4 & M' \end{bmatrix}$$

$$\times \int d\vec{r}_1\, d\vec{r}_2\; \varphi^*_{n_1\ell_1 m_1}(\vec{r}_1)\, \varphi^*_{n_2\ell_2 m_2}(\vec{r}_2)\, v(r_{12})\, \varphi_{n_3\ell_3 m_3}(\vec{r}_1)\, \varphi_{n_4\ell_4 m_4}(\vec{r}_2) \;. \qquad \text{(B8)}$$

En utilisant le développement multipolaire (B2) on peut sommer sur les angles Ω_1 et Ω_2 de $\vec{r}_1$ et de $\vec{r}_2$ et sommer ensuite sur tous les nombres quantiques magnétiques. (voir de Shalit, Talmi, op. cit.) On obtient l'expression suivante :

$$(n_1\ell_1, n_2\ell_2, LM|v(r)|n_3\ell_3, n_4\ell_4, L'M') = \delta_{LL'}\delta_{MM'}(n_1\ell_1, n_2\ell_2|v|n_3\ell_3, n_4\ell_4)_L \qquad (B9)$$

et :

$$(n_1\ell_1, n_2\ell_2|v|n_3\ell_3, n_4\ell_4)_L = \sum_k f_k(\ell_1\ell_2|\ell_3\ell_4)_L \, F^k(n_1\ell_1, n_2|n_3\ell_3, n_4\ell_4). \qquad (B10)$$

F^k est une intégrale de Slater du multipole v_k et ne dépend que de l'interaction et des fonctions radiales :

$$F^k(n_1\ell_1, n_2\ell_2|n_3\ell_3, n_4\ell_4) = \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 u^*_{n_1\ell_1}(r_1) u^*_{n_2\ell_2}(r_2) v_k(r_1, r_2) u_{n_3\ell_3}(r_1) u_{n_4\ell_4}(r_2) \qquad (B11)$$

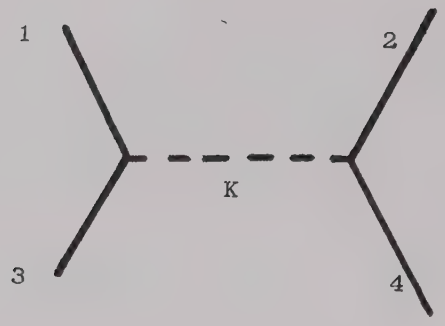
f_k ne dépend que des moments cinétiques :

$$f_k(\ell_1\ell_2|\ell_3\ell_4)_L = (-)^{\ell_2+\ell_4+L} \begin{Bmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ \ell_4 & \ell_3 & k \end{Bmatrix} \left[(2\ell_1+1)(2\ell_2+1)(2\ell_3+1)(2\ell_4+1)\right]^{1/2}$$

$$\times \frac{1}{2k+1} \begin{bmatrix} \ell_1 & \ell_3 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell_2 & \ell_4 & k \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} , \qquad (B12)$$

où $\begin{Bmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ \ell_4 & \ell_3 & k \end{Bmatrix}$ est un coefficient 6-j (Equation C.28, référence 2).

On dit que dans l'élément de matrice (B9) il y a un transfert de moment cinétique k par le multipole v_k de l'interaction :



Eléments de matrice dans le couplage L-S

On peut coupler les spins des particules 1 et 2 pour former un état de spin total (S,M_S) :

$$|S\ M_S) = \sum_{\sigma_1,\sigma_2=-1/2}^{+1/2} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & S \\ \sigma_1 & \sigma_2 & M_S \end{bmatrix} \chi_{\sigma_1}(1)\ \chi_{\sigma_2}(2)\ . \qquad (B13)$$

On couple également les isospins des particules 1 et 2 pour former un état d'isospin total (T,M_T) :

$$|T,M_T) = \sum_{\tau_1,\tau_2=-1/2}^{+1/2} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \tau_1 & \tau_2 & M_T \end{bmatrix} \chi_{\tau_1}(1)\ \chi_{\tau_2}(2)\ . \qquad (B14)$$

On forme ensuite un état à deux particules dans le couplage L-S , non-antisymétrisé, avec les fonctions (B7) et (B13) en couplant le moment cinétique orbital L au spin S pour former le moment cinétique total (J,M) :

$$|n_1\ell_1,n_2\ell_2,LS,JM,TM_T) = \sum_{M_L\ M_S} \begin{bmatrix} L & S & J \\ M_L & M_S & M \end{bmatrix} |n_1\ell_1,n_2\ell_2,L\ M_L)|S\ M_S)|T\ M_T). \qquad (B15)$$

Les opérateurs $(\vec{\sigma}_1.\vec{\sigma}_2)$ et $(\vec{\tau}_1.\vec{\tau}_2)$ sont des scalaires de spin et d'isospin. Les états (B13) et (B14) en sont des vecteurs propres appartenant aux valeurs propres :

$$(\vec{\sigma}_1.\vec{\sigma}_2)\ |S\ M_S) = |S\ M_S) \quad \text{si} \quad S = 1$$
$$= -3|S\ M_S) \ \text{si} \quad S = 0 \quad , \tag{B16}$$

ce qui peut s'écrire :

$$(\vec{\sigma}_1.\vec{\sigma}_2)|S\ M_S) = (4S-3)|S\ M_S) \qquad (\text{pour} \quad S=0 \text{ et } 1) \tag{B17}$$

On a de même :

$$(\vec{\tau}_1.\vec{\tau}_2)|T\ M_T) = (4T-3)\ |T\ M_T) \qquad (\text{pour} \quad T=0 \text{ et } 1) \tag{B18}$$

On obtient alors immédiatement l'élément de matrice de l'interaction centrale (B1) entre états (B15) en couplage L-S :

$$(n_1\ell_1, n_2\ell_2, LS, JM, T\ M_T|v|n_3\ell_3, n_4\ell_4, L'S', J'M', T'M_T')$$
$$= \delta_{LL'}\ \delta_{SS'}\ \delta_{JJ'}\ \delta_{MM'}\ \delta_{TT'}\ \delta_{M_TM_T'}\ (n_1\ell_1, n_2\ell_2|v|n_3\ell_3, n_4\ell_4)_{LSJT} \quad , \tag{B19}$$

avec :

$$(n_1\ell_1, n_2\ell_2|v|n_3\ell_3, n_4\ell_4)_{LSJT} =$$
$$\left[\beta + \gamma(4S-3) + \delta(4T-3) + \epsilon(4S-3)(4T-3)\right]$$
$$\times \sum_k f_k(\ell_1\ell_2|\ell_3\ell_4)_L\ F^k\ (n_1\ell_1, n_2\ell_2|n_3\ell_3, n_4\ell_4) \ . \tag{B20}$$

La dernière ligne est simplement l'élément de matrice (B9).

Eléments de matrice dans la base j-j

On forme également des états à deux particules dans le couplage j-j en plaçant ces particules dans les états $\varphi_{n\ell jm\tau}$ et en couplant les moments cinétiques j à un moment cinétique total (J,M) et en couplant les isospins à un isospin total (J,M_T) :

$$|n_1\ell_1 j_1, n_2\ell_2 j_2, JM, T\ M_T) \equiv$$

$$\sum_{m_1 m_2} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} \sum_{\tau_1 \tau_2} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \tau_1 & \tau_2 & M_T \end{bmatrix} \varphi_{n_1\ell_1 j_1 m_1 \tau_1}(1)\ \varphi_{n_2\ell_2 j_2 m_2 \tau_2}(2) \ . \qquad (B21)$$

Les états (B15) en couplage L-S et les états (B21) en couplage j-j forment chacun une base orthonormale des états à deux particules. On passe d'une base à l'autre par la transformation :

$$(n_1\ell_1, n_2\ell_2, LS, JM, T\ M_T | n_3\ell_3 j_3, n_4\ell_4 j_4, J'M', T'\ M'_T)$$

$$= \delta_{n_1 n_3}\ \delta_{\ell_1 \ell_3}\ \delta_{n_2 n_4}\ \delta_{\ell_2 \ell_4}\ \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \delta_{TT'} \delta_{M_T M'_T}$$

$$\times \left[(2j_1+1)(2j_2+1)(2L+1)(2S+1)\right]^{1/2} X \begin{pmatrix} \ell_1 & s_1 & j_1 \\ \ell_2 & s_2 & j_2 \\ L & S & J \end{pmatrix} , \qquad (B22)$$

où X( ) est un coefficient 9-j (équation C.40a, référence 2). Les éléments de matrice dans le couplage j-j se calculent à l'aide des éléments de matrice (B20) dans le couplage L-S et de la transformation (B22) :

$$(n_1\ell_1 j_1, n_2\ell_2 j_2, JM,\ T\ M_T | v | n_3\ell_3 j_3, n_4\ell_4 j_4, J'M', T'M'_T)$$

$$= \delta_{JJ'}\ \delta_{MM'}\ \delta_{TT'}\ \delta_{M_T M'_T} \left[(2j_1+1)(2j_2+1)(2j_3+1)(2j_4+1)\right]^{1/2}$$

$$\times \sum_{LS} (2L+1)(2S+1)\ X \begin{pmatrix} \ell_1 & s_1 & j_1 \\ \ell_2 & s_2 & j_2 \\ L & S & J \end{pmatrix} X \begin{pmatrix} \ell_3 & s_3 & j_3 \\ \ell_4 & s_4 & j_4 \\ L & S & J \end{pmatrix} (n_1\ell_1, n_2\ell_2 | v | n_3\ell_3, n_4\ell_4)_{LSJT} \ . \qquad (B23)$$

Etats et éléments de matrice antisymétrisés

Un état de deux particules dans les états $\varphi_{n_1 \ell_1 j_1 m_1 \tau_1}$ et $\varphi_{n_2 \ell_2 j_2 m_2 \tau_2}$ antisymétrisé s'écrit :

$$|n_1 \ell_1 j_1 m_1 \tau_1, n_2 \ell_2 j_2 m_2 \tau_2\rangle = b^{\dagger}_{n_1 \ell_1 j_1 m_1 \tau_1} \; b^{\dagger}_{n_2 \ell_2 j_2 m_2 \tau_2} \; |0\rangle \quad . \qquad \text{(B24)}$$

Cet état est normalisé et non-couplé. Par définition un état antisymétrisé de deux particules couplées à un moment cinétique (JM) et un isospin ($T\ M_T$) s'écrit (en couplage j-j) :

$$|j_1 j_2\ JM,\ T\ M_T\rangle = \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ \tau_1 \tau_2}} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \tau_1 & \tau_2 & M_T \end{bmatrix} b^{\dagger}_{j_1 m_1 \tau_1} \; b^{\dagger}_{j_2 m_2 \tau_2} \; |0\rangle \qquad \text{(B25)}$$

où j représente les trois nombres quantiques n, ℓ et j . Il est facile de vérifier qu'en échangeant les trois nombres quantiques des deux particules, on obtient :

$$|n_2 \ell_2 j_2,\ n_1 \ell_1 j_1, JM,\ T\ M_T\rangle = -(-)^{j_1+j_2-J+1/2+1/2-T} \; |n_1 \ell_1 j_1,\ n_2 \ell_2 j_2, JM, T\ M_T\rangle \qquad \text{(B26)}$$

Le produit scalaire de deux états (B25) est :

$$\langle j_1 j_2\ JM,\ T\ M_T | j_3 j_4\ J'M',\ T'M'_T\rangle$$

$$= \delta_{JJ'}\ \delta_{MM'}\ \delta_{TT'}\ \delta_{M_T M'_T} \left[\delta_{j_1 j_3}\ \delta_{j_2 j_4} - (-)^{j_1+j_2-J+1/2+1/2-T}\ \delta_{j_2 j_3}\ \delta_{j_1 j_4} \right] \qquad \text{(B27)}$$

où $\delta_{j_1 j_2} \equiv \delta_{n_1 n_2}\ \delta_{\ell_1 \ell_2}\ \delta_{j_1 j_2}$.

Ainsi lorsque $n_1 = n_2$, $\ell_1 = \ell_2$ et $j_1 = j_2$ l'état (B25) s'annule identiquement à moins que J+T soit impair, dans quel cas sa norme est égale à deux. (A cause de cela certains auteurs préfèrent normaliser les états (B25) lorsque $\delta_{j_1 j_2} = 1$ en le multipliant par $(1+\delta_{j_1 j_2})^{-1/2}$. Nous ne le faisons pas). La relation inverse de (B25) permet d'exprimer un état non couplé à partir des états couplés :

$$|j_1 m_1 \tau_1, j_2 m_2 \tau_2\rangle = \sum_{JT} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \tau_1 & \tau_2 & M_T \end{bmatrix} |j_1 j_2, JM, T\, M_T\rangle \qquad \text{(B28)}$$

où $M = m_1 + m_2$ et $M_T = \tau_1 + \tau_2$.

Un élément de matrice antisymétrisé et non-couplé de l'interaction est par définition :

$$\langle j_1 m_1 \tau_1,\ j_2 m_2 \tau_2 | v | j_3 m_3 \tau_3,\ j_4 m_4 \tau_4 \rangle$$

$$= \langle o |\ b_{j_2 m_2 \tau_2}\ b_{j_1 m_1 \tau_1}\quad V\quad b^{\dagger}_{j_3 m_3 \tau_3}\ b^{\dagger}_{j_4 m_4 \tau_4}\ | o \rangle$$

$$= - \langle j_2 m_2 \tau_2,\ j_1 m_1 \tau_1 | v | j_3 m_3 \tau_3,\ j_4 m_4 \tau_4 \rangle \quad . \qquad \text{(B29)}$$

Un élément de matrice antisymétrisé et couplé est par définition :

$$\langle j_1 j_2 | v | j_3 j_4 \rangle_{JT} =$$

$$\sum_{\substack{m_1 m_2 \\ \tau_1 \tau_2}} \begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_3 & j_4 & J \\ m_3 & m_4 & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \tau_1 & \tau_2 & M_T \end{bmatrix}^2 \langle j_1 m_1 \tau_1, j_2 m_2 \tau_2 | v | j_3 m_3 \tau_3, j_4 m_4 \tau_4 \rangle$$

$$= - (-)^{j_3 + j_4 - J + 1/2 + 1/2 - T} \langle j_2 j_1 | v | j_3 j_4 \rangle_{JT} \quad . \qquad \text{(B30)}$$

On montre aisément que l'élément de matrice antisymétrisé (B30) est donné en fonction des éléments de matrice non-antisymétrisés (B23) par la relation :

$$\langle j_1 j_2 | v | j_3 j_4 \rangle_{JT} =$$

$$(j_1 j_2 | v | j_3 j_4)_{JT} - (-)^{j_3+j_4-J+1/2+1/2-T} (j_1 j_2 | v | j_4 j_3)_{JT} \quad . \qquad \text{(B31)}$$

Enfin dans la représentation $\varphi_{n\ell m}(\vec{r})\ \chi_\sigma\ \chi_\tau$ un état antisymétrisé à deux particules s'écrit :

$$|n_1 \ell_1 m_1 \sigma_1 \tau_1, n_2 \ell_2 m_2 \sigma_2 \tau_2\rangle = b^\dagger_{n_1 \ell_1 m_1 \sigma_1 \tau_1}\ b^\dagger_{n_2 \ell_2 m_2 \sigma_2 \tau_2}\ |0\rangle \quad . \qquad \text{(B32)}$$

Un état antisymétrisé de deux particules dans le couplage L-S s'écrit :

$$|n_1 \ell_1 n_2 \ell_2\ LS\ JM\ T\ M_T\rangle \equiv \sum_{M_L M_S} \begin{bmatrix} L & S & J \\ M_L & M_S & M \end{bmatrix}$$

$$\sum_{m_1 m_2} \begin{bmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ m_1 & m_2 & M_L \end{bmatrix} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & S \\ \sigma_1 & \sigma_2 & M_S \end{bmatrix} \sum_{\tau_1 \tau_2} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \tau_1 & \tau_2 & M_T \end{bmatrix} b^\dagger_{n_1 \ell_1 m_1 \sigma_1 \tau_1}\ b^\dagger_{n_2 \ell_2 m_2 \sigma_2 \tau_2} |0\rangle$$

(B33)

Le produit scalaire des états (B33) est :

$$\langle n_1 \ell_1 n_2 \ell_2\ LS\ JM\ T\ M_T | n_3 \ell_3 n_4 \ell_4\ L'S'\ J'M'\ T'M'_T\rangle =$$

$$\delta_{LL'}\ \delta_{SS'}\ \delta_{JJ'}\ \delta_{MM'}\ \delta_{TT'}\ \delta_{M_T M'_T} \left[\delta_{13}\ \delta_{24} - (-)^{\ell_1+\ell_2+L+S+T}\ \delta_{14}\ \delta_{23}\right] , \qquad \text{(B34)}$$

où $\delta_{13} \equiv \delta_{n_1 n_3}\ \delta_{\ell_1 \ell_3}$

Enfin un élément de matrice antisymétrisé en couplage L-S s'écrit en fonction des éléments de matrice (B20) ainsi :

$$\langle n_1 \ell_1 n_2 \ell_2 | v | n_3 \ell_3 n_4 \ell_4 \rangle_{LST} =$$

$$(n_1 \ell_1 n_2 \ell_2 | v | n_3 \ell_3 n_4 \ell_4)_{LST} - (-)^{\ell_3+\ell_4+L+S+T} (n_1 \ell_1 n_2 \ell_2 | v | n_4 \ell_4 n_3 \ell_3)_{LST} \quad . \quad (B35)$$

RÉFÉRENCES

[1] - A. BOHR and B. MOTTELSON, Dan. Mat. Fys. Medd. 27, N°16 (1953) (third edition 1964).

[2] - A. MESSIAH, Quantum Mechanics, North-Holland Publishing Co., Amsterdam 1961 and Dunod, Paris 1959.

[3] - D. KURATH and L. PICMAN, Nucl. Phys. 10 (1959) 313

[4] - S.G. NILSSON Dan. Mat. Fys. Medd. 29, N°16 (1955)

[5] - A. VOLKOV, Nucl. Phys. 74 (1965) 33

[6] - J. HAYWARD, Nucl. Phys. 81 (1966) 193
D.M. BRINK, E. BOECKER, Nucl. Phys. A91 (1967) 1
MUTHUKRISHNAN, Nucl. Phys. A93 (1967) 417 .

[7] - I. KELSON, Phys. Rev. 132 (1963) 2189

[8] - I. KELSON and C.A. LEVINSON, Phys. Rev. 134 (1964) B 269

[9] - W.H. BASSICHIS, C.A. LEVINSON, I.KELSON, Phys. Rev. 136 (1964) B 380

[10] - G. RIPKA, Lectures in Theorical Physics, Vol. VIII-C, University of Colorado Press, 1966

[11] - BAR-TOUV and C.A. LEVINSON, Phys. Rev. 153 (1967) 1099 .

[12] - BAR-TOUV and I. KELSON, Phys. Rev. 138 (1965) B 1035

[13] - J.P. ELLIOTT, Selected Topics in Nuclear Theory, IAEA, Vienna 1963

M. MOSHINSKY, Group Theory and the Many Body Problem, E. Meeron GORDON and BREACH, New-York, 1965,

[14] - W.H. BASSICHIS, G. RIPKA, Phys. Lett. 15 (1965) 320

[15] - W.H. BASSICHIS, B. GIRAUD and G. RIPKA, Phys. Rev. Lett. 15 (1965 980

[16] - I. KELSON, Phys. Lett. 16 (1965) 143
G.J. STEPHENSON, M. BANERJEE, à paraître dans Phys. Lett.

[17] - G. RIPKA, Lectures delivered at the Institute of Theoretical Physics in Trieste, IAEA, 1966

[18] - K.T.R. DAVIES, S.J. KRIEGER, M. BARANGER, Nucl. Phys. 84 (1966) 545

[19] - $\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & M \end{bmatrix}$ est exactement égal au coefficient Clebsch-Gordan $\langle j_1\ j_2\ m_1\ m_2 | JM \rangle$ défini dans l'Appendice C de la référence 2 .

[20] - R. HOFSTADTER, Electron Scattering and nuclear and nucleon structure, W.A. Benjamin, New-York, 1963

[21] - V. GILLET, E. SANDERSON, Nucl. Phys. 31 (1967) 292.

[22] - G. RIPKA, International Conference on Nuclear Physics (1966) Gaithinburg - Tennessee.
DAS GUPTA and M. HARVEY, Nucl. Phys. A94 (1967) 593.

[23] - G.E. BROWN and A.M. GREEN, Nucl. Phys. 75 (1966) 401

[24] - M. BANERJEE, Communication privée

[25] - A. VOLKOV, Communication privée
MUTHUKRISHNAN, Ref. 6 .

[26] - R.E. PEIERLS and J.YOCCOZ, Proc. Phys. Soc. London, A70 (1967) 381 .

[27] - D.L. HILL and J.A. WHEELER, Phys. Rev. 89 (1953) 1106

[28] - B.J. VERHAAR, Nucl. Phys. 54 (1964) 641

[29] - J.A. KUEHNER, R.W. OLLERHEAD, Phys. Lett. 20 (1966) 301

[30] - J.N. SMIRNOV, Nucl. Phys. 39 (1962) 346

[31] - L. ZAMICK and G. RIPKA, Phys. Lett. 23 (1966) 347

[32] - H.A. MAVROMATIS, L. ZAMICK, G.E. BROWN, Nucl. Phys. 80 (1966) 545

[33] - M. de LLANO, P.A. MELLO, E. CHACON, J. FLORES, Nucl. Phys. 72 (1965) 679

[34] - D.R. INGLIS, Phys. Rev. 96 (1954) 1059

[35] - B. MOTTELSON, The Many Body Problem, Ecole d'Eté de Physique Thèorique, Les Houches 1958, Dunod, Paris and Willey and Sons, New-York.

[36] - C.W. WONG, Nucl. Phys. A91 (1967) 399.
T.T.S. KUO, G.E. BROWN, Nucl. Phys. 85 (1966) 40
B.H. BRANDOW, "The theory of Effective Interaction" Varenna Summer school Seminar (1965)
A.D. MAC KELLAR, R.L. BECKER, Phys. Lett. 18 (308) 1965
C.M. SHAKIN, J.P. SVENNE, Y.P. Waghmare, Phys. Lett. 21 (209)
Voir les contributions de M. BARANGER, H. BETHE, W.H. BASSICHIS, KERMAN and SVENNE to the International Conference on Nuclear Physics (1966) Gatlinburg, Tennessee.

[37] - V. GILLET Nucl. Phys.51 (1964) 410 - Thèse, University of Paris (1962).

[38] - J.P. ELLIOTT and B.H. FLOWERS, Proc. Roy. Soc. (London) A229 (1965) 536 .

[39] - CARTER, MITCHELL and DAVIS, Phys. Rev. 133 (1964) B1421.

[40] - N. VINH-MAU and G. BROWN, Phys. Lett. 1 (1962) 361 .

[41] - J.M. EISENBERG,SPICER, M.E. ROSE, Nucl. Phys. 71 (1965) 273.

[42] - G. RIPKA, Proc of the Paris Conference on Nuclear Structure (1964) C174.
L. ZAMICK, Phys. Lett. 19 (1965) 580.

[43] - S. GORODETZKY, P. MENNRATH, N. BENENSON, P. CHEVALIER, F. SCHEIBLING, Journal de Physique 24 (1963)

[44] - I. UNNA, I. TALMI, Phys. Rev. 112 (1958) 452.

[45] - M.K. BANERJEE, G.J. STEPHENSON, Jr. "Shape of The four particle-four hole state of ^{16}O", à paraître

[46] - E. Boecker, Phys. Lett. 21 (1966) 69
L.S. Celenza, A. Klein, à paraître.

[47] - Certains calculs indiquent qu'il en est ainsi. Cela pour les noyaux de la couche 2s-1d en développant les orbites sur les états (n_x, n_y, n_z) d'un oscillateur harmonique déformé et en utilisant soit une force de Volkov (A. VOLKOV : communication privée) soit une force de Kallio-Kolltveit (A. LANDE : "Variational calculations in light nuclei with realistic nucleon-nucleon interactions" à paraître).

[48] - I. KELSON, Phys. Rev. 134 (1964) B 267.

[49] - D.J. THOULESS and J.G. VALATIN, Nucl. Phys. 31 (1962) 211.

Manuscrit reçu le 10 novembre 1967

DEUXIEME THESE

Propositions données par la Faculté

Vu et approuvé :
Orsay, le 16 mai 1967
Le Doyen de la Faculté des Sciences,
J. BERGERARD

Vu
et Permis d'imprimer :
Le Recteur de l'Académie
de Paris,
J. ROCHE

IMPRIMERIE LOUIS-JEAN
Publications scientifiques et littéraires
TYPO - OFFSET
05 - GAP - Téléphone 14-23 14-24
Dépot légal : n° 339 - 1968